

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES

Estudio de la funcionalización de secciones
eficaces nodales en multigrupos para cálculos
3D neutrónicos-termohidráulicos para núcleos
PWR

PROYECTO FIN DE CARRERA

SANTIAGO SÁNCHEZ-CERVERA HUERTA

TÍTULO DEL PROYECTO: Estudio de la funcionalización de secciones eficaces nodales en multigrupos para cálculos 3D neutrónicos-termohidráulicos para núcleos PWR

ENTIDAD PROPONENTE:
Departamento Ingeniería Nuclear

Nº PROYECTO: 10803370

TUTOR(ES) ASIGNADO(S): Nuria García Herranz
José Javier Herrero Carrascosa

FECHA de COMIENZO: 01/09/2010

NOMBRE del ALUMNO: Santiago Sánchez-Cervera Huerta

Nº de MATRICULA: 03370

ESPECIALIDAD E INTENSIFICACIÓN: Técnicas Energéticas. Ingeniería Nuclear

DESCRIPCIÓN DEL PROYECTO Y SUS OBJETIVOS PRINCIPALES


El objetivo del proyecto ha sido desarrollar una funcionalización de las secciones eficaces nodales en multigrupos para códigos tridimensionales de núcleos de agua a presión. Se ha estudiado la dependencia de las secciones eficaces con las condiciones locales de operación: temperatura del combustible, temperatura del moderador, densidad del moderador y concentración de boro. Y se ha desarrollado un modelo que permite determinar las secciones eficaces en función de dichas variables operacionales. De esta forma, pueden reproducirse en el cálculo nodal 3D valores precisos de las secciones eficaces para la resolución de la ecuación de difusión en multigrupos. Se consigue así evitar el uso de ingentes librerías de secciones eficaces pregeneradas para todas las posibles combinaciones de condiciones de operación.

Este estudio se ha realizado a nivel de elemento combustible, analizando las diferencias y similitudes con la funcionalización requerida a nivel de celda, estudiándose igualmente condensaciones en distintos números de grupos de energía para obtener una librería de tamaño óptimo.

Las actividades desarrolladas han sido: i) utilización de un código de transporte determinista para obtener secciones eficaces homogeneizadas a nivel de elemento; ii) desarrollo de un procedimiento para la generación de todos los parámetros al cambiar las condiciones de operación y análisis de la variación de las secciones eficaces al cambiar dichas condiciones, estudiando los posibles efectos cruzados; iii) una vez finalizado el estudio de la funcionalización de los parámetros con las variables locales, se ha valorado esta librería mediante cálculos con el código de difusión 3D COBAYA3.

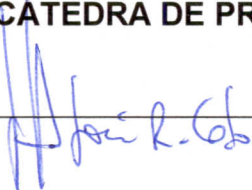
OBSERVACIONES:

ENTIDAD PROPONENTE:

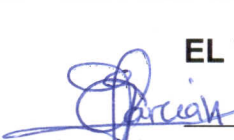

Nombre: Dpto. Ingeniería Nuclear

POR LA CÁTEDRA DE PROYECTOS

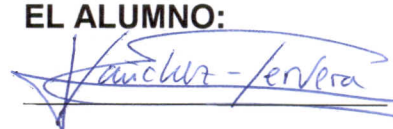
Nombre:



EL TUTOR:


Nuria García Herranz, José Javier Herrero Carrascosa

EL ALUMNO:


Nombre: Santiago Sánchez-Cervera Huerta

Este proyecto fin de carrera ha sido financiado por el Consejo de Seguridad Nuclear mediante una beca de la Cátedra de Seguridad Nuclear Federico Goded del Departamento de Ingeniería Nuclear de la UPM.

Agradecimientos

En primer lugar quiero dedicar este Proyecto Fin de Carrera a mis padres, Santiago y Ana, por todo el apoyo y la ayuda que siempre me han prestado en todos estos años de carrera y por todo lo que hacen y han hecho por mí. A mi hermana Adriana que también me ha alentado en todo momento.

También se lo quiero dedicar a mi abuelo José María, y a mis abuelos ausentes, a los que tantas veces he pedido ayuda para superar los momentos difíciles.

Con especial cariño se lo brindo a mis tutores, Nuria y José Javier, por la paciencia que han tenido conmigo y la ayuda que me han prestado en la elaboración del Proyecto, además de por todo lo que he aprendido con ellos. Quiero expresar mi especial gratitud a Dña. Carolina Ahnert, directora del Departamento de Ingeniería Nuclear, por haberme dado la oportunidad de trabajar en el Departamento estos meses.

A Flavia, pilar básico en mi vida por el apoyo que es para mí en todo momento.

A mis amigos y compañeros de carrera, compañeros de alegrías y de sufrimientos, por todo lo que hemos vivido juntos en estos años. En especial a mis compañeros de Especialidad.

A mis compañeros del Departamento de Ingeniería Nuclear y del Instituto de Fusión Nuclear, por el excelente clima de trabajo que han sabido crear que ha hecho que esta estancia aquí haya sido tan agradable. Especialmente a mi compañero, y ante todo gran amigo, Javier Jiménez por la infinita ayuda que me ha prestado desde el primer día. A él debo gran parte de este proyecto.

Y no me puedo olvidar de todos los grandes profesores que he tenido en la carrera, especialmente en la Especialidad. Todos aquellos que con tanto talento han sido maestros ejemplares de varias disciplinas, en especial los profesores Eduardo Gallego, Óscar Cabelleros y José María Aragonés, que tanto trabajo han dedicado en beneficio de la Ciencia y Tecnología Nuclear en España.

Índice general

Índice de figuras	6
Índice de tablas	7
1 Introducción	9
1.1 Encuadre del proyecto	9
1.2 Objetivos y alcance del proyecto	11
1.3 Estructura del proyecto	13
2 Análisis tridimensional de núcleos PWR	15
2.1 Cálculo neutrónico del núcleo	15
2.1.1 Transporte directo	15
2.1.1.1 Métodos estocásticos	16
2.1.1.2 Métodos deterministas	17
2.1.2 Aplicación estándar	17
2.2 Códigos de transporte para cálculo de secciones eficaces: códigos <i>lattice</i> . .	20
2.2.1 Elementos de un código <i>lattice</i>	20
2.2.2 El código NEWT de SCALE	23
2.3 Códigos de difusión. Descripción del COBAYA3	25
3 Descripción de librerías de secciones eficaces para cálculos de difusión	28
3.1 Almacenamiento de Datos Nucleares: Librerías	28
3.2 Datos nucleares necesarios en cálculos de difusión	31
3.2.1 Secciones Eficaces	32
3.2.2 Factores de discontinuidad	36
3.2.3 Otros parámetros	38
3.2.3.1 Espectro de Fisión	38
3.2.3.2 Parámetros cinéticos: fracción de neutrones diferidos, constantes de decaimiento e inverso de la velocidad	38

4	Generación de librerías de secciones eficaces con códigos de transporte deterministas	43
4.1	Definición del espacio paramétrico para todas las condiciones de operación en núcleos PWR	43
4.2	Configuraciones geométricas	45
4.3	Generación de inputs: código pre-proceso	49
4.3.1	Estructura de un input de NEWT	49
4.3.2	Procedimiento de generación de los inputs	58
4.4	Tratamiento de los outputs: código post-proceso	59
5	Análisis de las variaciones al cambiar las variables locales	65
5.1	Variables locales	65
5.2	Ajuste por mínimos cuadrados	67
5.3	Estudio de las secciones eficaces y factores de discontinuidad al variar una única variable	70
5.3.1	Secciones eficaces de dispersión	78
5.3.2	Factores de discontinuidad	83
5.4	Estudio de las secciones eficaces y factores de discontinuidad en los ajustes múltiples	84
5.5	Ejemplo del ajuste completo para una sección eficaz	93
5.6	Polinomios de ajuste propuestos para las secciones eficaces y factores de discontinuidad	96
5.6.1	Dos grupos de energía	97
5.6.2	Cuatro grupos de energía	98
5.6.3	Ocho grupos de energía	101
6	Valoración de la funcionalización obtenida con COBAYA3	108
6.1	Verificación a nivel 2D	108
6.1.1	Definición	108
6.1.1.1	Objetivo	108
6.1.1.2	Descripción	108
6.1.2	Resultados	109
6.2	Verificación a nivel 3D	112
6.2.1	Definición	112
6.2.1.1	Objetivo	112
6.2.1.2	Descripción	113
6.2.2	Resultados	114
7	Conclusiones y trabajo futuro	124

7.1 Conclusiones	124
7.2 Incertidumbres y sensibilidades	125
7.2.1 Aplicación al caso de una librería parametrizada: optimización . . .	126
Anexos	128
A Tablas de composición de materiales para la generación de inputs	129
B Presupuesto	132
C Programación temporal de las actividades realizadas	134
Bibliografía	138

Índice de Figuras

2.1	Flujo de cálculo estándar en el diseño de núcleos	19
2.2	Diagrama de flujo para los cálculos <i>lattice</i>	21
2.3	Modelización de NEWT para un cuarto de <i>pin-cell</i> con un mallado de 4x4	24
4.1	Geometrías de las pin-cell	47
4.2	Disposición de un elemento combustible	47
4.3	Disposición de $\frac{1}{4}$ elemento combustible en un archivo gráfico generado por NEWT	48
4.4	Rutina para la generación automática de inputs	60
4.5	Tabla de salida del programa COMPCDFS con los datos de secciones eficaces	61
4.6	Tabla de salida del programa COMPCDFS con los datos cinéticos	61
4.7	Rutina para crear las tablas conjuntas de todos los grupos	62
4.8	Extracto de una tabla completa en dos grupos de energía	62
4.9	Diagrama de flujo global del proceso	63
5.1	Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo rápido con diferentes concentraciones de boro.	72
5.2	Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo rápido para diferentes temperaturas del moderador	72
5.3	Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo rápido para diferentes temperaturas del combustible	73
5.4	Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo térmico para diferentes concentraciones de boro	74
5.5	Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo térmico para diferentes temperaturas del moderador	74

5.6	Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo térmico para diferentes temperaturas del combustible	75
5.7	Representación de la sección eficaz de transporte frente a la concentración de boro para el grupo rápido para diferentes densidades del moderador . .	76
5.8	Representación de la sección eficaz de fisión en función de la densidad del moderador para el grupo rápido para diferentes valores de ppm	78
5.9	Representación de la sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 2 en función de la densidad del moderador para diferentes valores de concentración de boro	82
5.10	Representación de la sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 1 en función de la densidad del moderador para diferentes valores de temperatura del moderador	82
5.11	Gráfico de los residuos frente a la densidad	89
5.12	Gráfico de los residuos frente a la densidad para determinar un efecto cruzado	91
5.13	Gráfico de los residuos frente a la concentración de boro para determinar un efecto cruzado	92
6.1	Esquema del acoplamiento entre el código COBAYA (neutrónico) y COBRA (termohidráulico)	113
6.2	Perfil de temperatura del combustible en un elemento combustible en un cálculo 3D	116
6.3	Perfil de temperatura del moderador en un elemento combustible en un cálculo 3D	117
6.4	Perfil de la densidad del moderador en un elemento combustible en un cálculo 3D	118
6.5	Perfil de la potencia en un elemento combustible en un cálculo 3D	119
6.6	Comparación de los perfiles de potencia, temperatura y densidad del moderador en un cálculo 3D	120

Índice de Tablas

3.1	Neutrones diferidos provenientes de fisiones térmicas, en U-235 y Pu-239 . . .	40
4.1	Rango de variación de las variables locales de operación o <i>data points</i> . . .	44
4.2	Grupos de Energia	45
4.3	Dimensiones de las pin-cell (cm)	46
4.4	Regiones de materiales en las pin-cell	46
6.1	Comparación de los resultados obtenidos en la k-eff en cálculos 2D	110
6.2	Secciones eficaces empleadas en los cálculos 2D	111
6.3	Comparación de los resultados obtenidos en la k-eff en 2D al emplear una librería tabulada y otra parametrizada	112
6.4	Comparación de los resultados obtenidos en la k-eff en 3D al emplear una librería tabulada y otra parametrizada en dos grupos de energía	114
6.5	Comparación de los resultados obtenidos en la k-eff en 3D al emplear una librería tabulada y otra parametrizada en cuatro grupos de energía	114
6.6	Comparación de los resultados obtenidos en la k-eff en 3D al emplear una librería tabulada y otra parametrizada en ocho grupos de energía	115
6.7	Valores de las variables con eliminación de puntos intermedios	121
6.8	Comparación de resultados entre una librería tabulada con mayor y menor número de puntos	121
6.9	Valores de las variables con 3 puntos en cada una de ellas	122
6.10	Comparación de resultados entre una librería tabulada con mayor y menor número de puntos	122
A.1	Tabla de composiciones para el material IFBA en función del quemado (unidades átomos/barnio·cm)	130
A.2	Extracto de la tabla de composiciones del combustible UO_2 en función del quemado (unidades átomos/barnio·cm)	131
C.1	Secuencia temporal de actividades realizadas	135

Capítulo 1

Introducción

1.1. Encuadre del proyecto

Este proyecto fin de carrera está enmarcado dentro de un proyecto europeo del 7^o Programa MARCO denominado NURISP (NUclear Reactor Integrated Simulation Project). Dicho proyecto es un proyecto colaborativo, realizado por diversas instituciones, entre las que se encuentra la Universidad Politécnica de Madrid que participa a través del Departamento de Ingeniería Nuclear. NURISP surge con el propósito de desarrollar una plataforma a nivel europeo sobre simulación de reactores nucleares, basado sobre todo para aplicaciones para núcleos PWR y BWR, pero que se puede emplear también en el caso de los reactores futuros.

El primer paso de este ambicioso objetivo se dio con el proyecto NURESIM, el predecesor de NURISP, que se desarrolló entre los años 2005 y 2008. El proyecto NURISP, que comenzó en enero de 2009, parte de las bases establecidas por NURESIM y está completando aún más su ya compartida y eficaz plataforma informática. Esta plataforma va a proveer de una representación más exacta de los fenómenos físicos desarrollando e incorporando en los códigos *best-estimate* los últimos avances sobre modelos de física del núcleo, modelos termo-hidráulicos bifásicos y de combustible.

Con objeto de extender por todo el mundo las aplicaciones de la ciencia e ingeniería nuclear la industria nuclear, universidades y centros de investigación y desarrollo necesitan una nueva generación de herramientas de simulación, que dispongan de códigos de cálculo más precisos, más rápidos, más fáciles de manejar y sencillos de implementar. Una mayor precisión en el modelizado de fenómenos físicos implica una aproximación multi-escala y multi-física. La famosa Ley de Moore predice que una simulación con el tiempo irá siendo cada vez más barata. Sin embargo, el desarrollo de los software y la validación de costes están en constante crecimiento por lo que la validación de las bases de datos cada vez está siendo más difícil de llevarse a cabo. La comunidad de la industria nuclear está adquiriendo consciencia de que los desarrollos colaborativos van a ser respaldados por consorcios multinacionales y por una amplia comunidad de usuarios con objeto de

compartir el desarrollo y validación de costes a la vez que se mejora el asesoramiento y la disponibilidad de los códigos, la calidad y la confidencialidad.

Por tanto, los proyectos NURESIM y su evolución, NURISP, pretenden asentar las bases para una Plataforma Común Europea Estándar de Software para modelizar, registrar y recopilar datos informáticos correspondientes a simulaciones de reactores nucleares. Como plataforma común también facilita el intercambio de datos e información entre entidades miembro. Por ello los objetivos clave de NURISP pueden sintetizarse de la siguiente forma:

1. Integración de los modelos físicos avanzados en una plataforma de software compartida.
2. Promocionar e incorporar los últimos avances sobre física del núcleo y del reactor con acoplamiento termo-hidráulico.
3. Evaluación progresiva, empleando para ello técnicas de análisis de sensibilidad e incertidumbre, tanto estadísticos como deterministas, y técnicas de *benchmarking*.
4. Excelencia en la calidad.

Los objetivos de NURISP se están llevando a cabo en seis sub-proyectos, a saber:

- SP0 (Sub-Project 0): Coordinación general
- SP1: Física del Núcleo
- SP2: Termo-hidráulica
- SP3: Multi-física
- SP4: Validación del modelo, calibración, análisis de sensibilidad y cuantificación de la incertidumbre
- SP5: Integración

Este proyecto está incluido dentro del SP1, que además es coordinado por la UPM, por lo que detallaremos los objetivos fundamentales de este apartado.

El objetivo general correspondiente al sub-proyecto de Física del Núcleo es el desarrollo y evaluación de herramientas y códigos avanzados de simulación numérica sobre física del núcleo para poder aplicarlos tanto en la actual generación de reactores (incluyendo plantas de potencia y reactores de investigación) como en la generación de reactores futuros. Para poder conseguir este objetivo es necesario adaptar la plataforma de NURESIM con capacidad para simular cinética neutrónica a la resolución requerida en cuanto a energía

de los neutrones y escalas espacial y temporal; y dotarla de un adecuado acoplamiento con la termohidráulica y las propiedades termo-mecánicas del combustible. [23]

Los objetivos específicos del sub-proyecto SP1 pueden resumirse como:

- Alcanzar un elevado grado de desarrollo de un sistema fiable de códigos neutrónicos cinéticos para la simulación numérica en temas de seguridad. Esta meta tiene que ser lograda, no sólo mediante la incorporación de las funcionalidades adicionales, de la eficiencia y precisión necesarias a la plataforma de Física de Núcleo de NURESIM; sino también incrementando la utilidad y consistencia mediante rutas calculadas bien establecidas coherentes en términos de datos (secciones eficaces, geometría, definiciones de materiales, etc.), opciones de modelado (mallados, orden de solución, etc.) e integración de códigos.
- Generar unos procesos de evaluación y verificación de la plataforma suministrando herramientas con objeto de calcular configuraciones realistas de plantas de potencia e/o instalaciones experimentales, en coordinación con los sub-proyectos de Termo-Hidráulica, Multi-física, Validación y Análisis de Sensibilidad, e Integración; SP2-SP5 respectivamente.

Los outputs concretos del SP1, sub-proyecto Física del Núcleo son:

- Los códigos TRIPOLI4 [26] (código de Monte Carlo) y APOLLO2 [31] (código de transporte determinista) permiten realizar cálculos con la resolución necesaria en cuanto a energía de los neutrones y espacialmente para modelar los reflectores y las celdas *lattice* de combustible de los reactores de potencia y experimentales, actuales y futuros.
- Códigos como el COBAYA3 [14] (código de difusión) permiten simulaciones sistemáticas a nivel 3D de todo el núcleo, tanto a nivel de celda (*pin-by-pin*) como nodal (elemento combustible) multi-escala, y se pueden acoplar correctamente con códigos termo-hidráulicos a nivel de celda, núcleo y sistema, desarrollados en los SP2 y SP3, incluyendo asimismo métodos avanzados de cálculo de sensibilidad y propagación de incertidumbres, desarrollado en el SP4.
- Una serie de documentos de referencia denominados *benchmarks*, que se emplean en la verificación y demostración de códigos y bases de datos que se van a utilizar en el SP3 y SP4.

1.2. Objetivos y alcance del proyecto

La tendencia más extendida actualmente para el análisis tridimensional de núcleos de agua a presión se basa en cálculos de difusión nodales, es decir, resolución de la ecuación de difusión en multigrupos con homogenización a nivel de elemento combustible (o 1/4

de elemento).

A la hora de aplicar métodos nodales a núcleos de agua ligera (LWR) de manera fiable y satisfactoria, se requieren fundamentalmente dos elementos principales: en primer lugar, códigos de difusión eficientes y precisos a nivel nodal en multigrupos; y en segundo lugar, metodologías para producir adecuadamente parámetros equivalentes en multigrupos para usarse posteriormente en los códigos.

El primer asunto fue tratado ampliamente en el proyecto NURESIM (concretamente en el SP1) donde fueron desarrolladas nuevas herramientas con capacidad de análisis multidimensional y en multigrupos como una demanda a los complejos diseños de núcleos con fuertes efectos espectrales y heterogeneidades. Más concretamente, en esta tarea la UPM desarrolló un solver tridimensional en multigrupo llamado ANDES (Analytic Nodal Diffusion Equation Solver) que dentro implementaba el código de difusión en multigrupo COBAYA3. COBAYA3 puede ser utilizado como código nodal independiente o como código *pin-by-pin*, y en ambos casos ANDES emplea un solver para acelerar la convergencia del cálculo del núcleo *lattice* completo.

El segundo aspecto, el procedimiento de generación de librerías de secciones eficaces para cálculos de difusión es tratado en el proyecto NURISP y en él se enmarca el trabajo realizado en este proyecto fin de carrera.

Estos códigos de difusión emplean como datos de entrada librerías de parámetros equivalentes homogeneizados. Estos parámetros son fundamentalmente secciones eficaces y factores de discontinuidad, y dependen de las variables locales de operación del reactor, a saber: temperatura del combustible, temperatura del moderador, densidad del moderador y concentración de boro en el refrigerante. Típicamente, estos parámetros homogeneizados se pregeneran para cada tipo de elemento combustible con un código de transporte determinista.

Una librería multidimensional con las secciones eficaces pregeneradas para todas las posibles combinaciones de las condiciones de operación del reactor no resultaría nada práctica ya que conduciría a requisitos ingentes de memoria. Para evitar este inconveniente el **objetivo de este proyecto** es desarrollar un modelo que represente las secciones eficaces en función de las variables de operación. De esta forma, almacenando en la librería las dependencias con dichas variables pueden reproducirse valores de las secciones eficaces en los cálculos posteriores de difusión, en función de las condiciones reales de los elementos combustibles en el núcleo.

Sin embargo, estas librerías no son fácilmente parametrizables si se pretenden captar todos los efectos, espaciales y espectrales, debidos a las heterogeneidades presentes en los reactores. Por ello es necesario realizar un análisis en profundidad de las dependencias de las secciones eficaces y demás parámetros nodales con las variables locales.

Para lograr este objetivo final se siguen los siguientes pasos:

- Generación de datos en un espacio multi-paramétrico: código pre-proceso. Mediante programas y rutinas auxiliares se generan los inputs que posteriormente se van a ejecutar con un código de transporte, de manera que cubran todo el espacio paramétrico, abarcando todo el rango de condiciones de operación y configuraciones posibles para el núcleo de un reactor. En el caso particular del presente proyecto se verá que se han utilizado programas en lenguaje FORTRAN y rutinas del entorno LINUX.
- Utilización del código NEWT para ejecutar los casos y obtener los outputs con los parámetros de los que se van a estudiar sus dependencias (secciones eficaces, factores de discontinuidad, ...).
- Generación de librerías parametrizadas, aproximación mediante polinomios multi-variables, etc. para cada tipo de elemento combustible. Este conjunto de operaciones es lo que se denomina el código post-proceso. Los outputs obtenidos al ejecutar los códigos de transporte se analizan, se estudian las dependencias de los parámetros con las variables, y el modelo obtenido se almacena en una librería. Podemos avanzar que para el presente proyecto se ha empleado para el estudio de la funcionalización de los parámetros el programa estadístico R, también del entorno LINUX.
- Estudio de las similitudes y diferencias entre la funcionalización requerida a nivel de elemento y a nivel de celda.
- Estudio de posibles condensaciones en distintos números de grupos para alcanzar una librería de de tamaño óptimo.
- Valorar la funcionalización realizada mediante cálculos nodales con el solver nodal de difusión 3D ANDES de COBAYA3.

1.3. Estructura del proyecto

El proyecto está dividido en 7 capítulos, incluyendo el presente a modo de introducción, más 3 anexos. En este primer capítulo de introducción se ha expuesto el origen y motivación del proyecto, enmarcándolo dentro del proyecto NURISP, y seguidamente se han comentado los objetivos y el alcance del mismo.

En el capítulo 2 se plantea la necesidad de los métodos nodales 3D de difusión, justificando su utilización a partir de la denominada aplicación estándar. Seguidamente se analizan los códigos de transporte para la obtención de secciones eficaces, analizando la diferencia entre los métodos deterministas y los probabilistas o estocásticos, particularizando el análisis en el código NEWT empleado en la realización de este proyecto.

Finalmente también se mencionan los códigos de difusión, describiendo sobre todo el código COBAYA3.

En el capítulo 3 se realiza una descripción de las librerías de secciones eficaces, exponiendo los tipos de librerías existentes para cálculos de difusión y justificando la necesidad de librerías parametrizadas. También se analizan los datos necesarios para los cálculos posteriores.

El capítulo 4 completa la primera parte del proyecto, basada en el estudio y utilización de códigos de transporte para la obtención de secciones eficaces y otros parámetros cinéticos para su uso en cálculos nodales. En este capítulo se define claramente cuál es el espacio paramétrico así como las configuraciones geométricas, empleando para ello documentos del proyecto NURISP. También se detallan los procedimientos y pasos dados tanto en el código pre-proceso como en el post-proceso.

La segunda parte, y parte principal del proyecto, correspondiente al análisis de la variación de los parámetros al cambiar cada variable local y al estudio de su funcionalización, se relata en el capítulo 5. Aquí se representan gráficamente las dependencias de las secciones eficaces con cada variable, y se estudia la linealidad de dicha dependencia proponiendo los polinomios de ajuste necesarios. Igualmente, se ajusta esta dependencia utilizando análisis de mínimos cuadrados.

Por último, en la parte final del proyecto se pretende valorar la funcionalización realizada mediante cálculos nodales con el código de difusión ya mencionado de COBAYA3. En el capítulo 6 se utiliza la librería de secciones eficaces generada en un cálculo nodal con realimentación termo-hidráulica y se compara con otras librerías tabuladas.

El capítulo 7 se corresponde con las conclusiones del proyecto, y se deja la puerta abierta al trabajo futuro.

Finalmente se incorporan los anexos, donde se adjunta información complementaria como tablas empleadas, la valoración económica del proyecto y una secuencia de actividades realizadas.

Capítulo 2

Análisis tridimensional de núcleos PWR

El análisis tridimensional de los reactores actuales de agua a presión es fundamental para conocer de forma realista las distribuciones de potencia, valor de las barras, márgenes de parada, tasas de quemado isotópicas, etc. El análisis del núcleo depende críticamente de los modelos empleados para resolver la ecuación tridimensional del transporte neutrónico, supuestos conocidos los datos nucleares fundamentales y las propiedades termohidráulicas del reactor.

En el presente capítulo se hace una breve revisión de los métodos de resolución de la ecuación de transporte, pasando a continuación a explicar los métodos basados en la ecuación de difusión, de entre los cuales justificaremos la importancia de los métodos nodales.

2.1. Cálculo neutrónico del núcleo

Las dos grandes metodologías existentes para hacer cálculos 3D de núcleo son el transporte directo y la denominada aproximación estándar, en la que se emplean dos etapas.

2.1.1. Transporte directo

El **transporte directo** tiene el objetivo extremo de modelar directamente el núcleo heterogéneo 3D usando la teoría del transporte. Esta tendencia está más enfocada a preparar el camino de los futuros códigos que funcionen dentro de 5-10 años bajo computadores de mayor potencia de cálculo que los actuales. Los métodos de resolución de la ecuación de transporte neutrónico se dividen en dos grandes grupos: métodos deterministas y métodos estocásticos (también conocidos como métodos de Monte Carlo)

2.1.1.1. Métodos estocásticos

Conviene introducir que dentro del campo de los métodos estocásticos gracias a los computadores cada vez más rápidos ha habido un gran avance en las aplicaciones de estos métodos al análisis de la física de reactores. En el pasado, los métodos de Monte Carlo se empleaban fundamentalmente para cálculos de blindaje y el cálculo de k_{eff} en sistemas críticos. Más recientemente, estos métodos se han ido aplicando cada vez más a la determinación de las distribuciones de potencia y muchos otros parámetros del diseño, tales como coeficientes de reactividad, Doppler, β_{eff} , etc.

Las principales ventajas de estas técnicas son:

- Permiten llevar a cabo un modelado general y exacto de la geometría y de los materiales.
- Permiten igualmente un uso directo de las mejores bases de datos de secciones eficaces (ENDF/B, JEFF, JENDL, ...)
- En las técnicas de Monte Carlo el transporte y la física de neutrones se realizan en energía continua, sin aproximaciones en multigrupos, permitiendo de esta forma un tratamiento más detallado de los datos nucleares.

Los métodos deterministas requieren geometrías razonablemente simples para las técnicas numéricas que emplean y usan aproximaciones de multigrupos para las secciones eficaces continuas con la energía. Las técnicas de Monte Carlo pueden manejar complejas geometrías tridimensionales y datos de secciones eficaces continuas en energía. Como no se discretiza el espacio físico, no se requiere hacer aproximaciones promedio en espacio, tiempo y energía. Por ello, se permite un tratamiento más detallado de los datos físicos.

En cuanto a las desventajas caben mencionarse las siguientes:

- Algunas desventajas radican en su naturaleza estadística, no suministrando por tanto una solución exacta del problema, sino que los resultados representan estimaciones con las incertidumbres asociadas. Demandan mucho tiempo de computación para conseguir incertidumbres bajas.
- La necesidad de definir la composición del medio y sus condiciones termohidráulicas como parámetros fijos del problema hace que las técnicas de Monte Carlo no puedan emplearse para simulaciones de escenarios operacionales donde haya importantes efectos de realimentación no lineales (es decir, donde las secciones eficaces, parámetros de la ecuación de transporte, dependan de la solución del flujo neutrónico). Tal es el caso de planificación de maniobras operacionales, análisis de recargas de combustible, etc. Para este tipo de análisis, los métodos deterministas son capaces de realizar simulaciones suficientemente precisas.

Los códigos de transporte estocásticos más extendidos son MCNP (versión 5)[27], americano y desarrollado en el Laboratorio Nacional de Los Álamos; y TRIPOLI[26], desarrollado en Francia. También se pueden destacar igualmente SERPENT [19] y KENO[12].

2.1.1.2. Métodos deterministas

Se suele decir que “las técnicas deterministas dan una solución exacta a un problema aproximado, mientras que las técnicas de Monte Carlo dan una solución aproximada a una representación exacta del problema real”.

Los métodos deterministas recurren para resolver la ecuación de transporte a una discretización del dominio sobre el que se extiende el flujo neutrónico angular, esto es, una discretización del espacio, ángulo de la dirección de los neutrones y energía de los mismos, y en función del tipo de técnica se pueden subclasificar en tres grandes grupos:

- **Ordenadas discretas S_n y P_n :** Se emplean en geometrías complejas, multigrupos y para el transporte de neutrones y radiación. Sin embargo tiene dificultades al tratar geometrías curvilíneas que aparecen con la heterogeneidad de los elementos combustibles.
- **Probabilidades de colisión P_{ij} :** El método de probabilidades de colisión se usa en problemas donde se puede emplear la aproximación de fuente plana en cada región homogénea, en geometrías con cierta simetría, multigrupos y quemado isotópico.
- **Método de características MOC:** Emplea igualmente la aproximación de fuente plana en cada región homogénea, geometrías complejas, multigrupos y quemado isotópico.

Aunque se han desarrollado varios métodos de transporte determinista en 3D, ninguno de ellos ha podido ser aplicado a problemas realistas de núcleo completo de una forma sencilla por la gran cantidad de memoria y recursos de cálculo que consumen. Entre ellos, el método de ordenadas discretas es el más ampliamente utilizado, pese a presentar el problema debido a las heterogeneidades presentes. El método MOC proporciona soluciones muy precisas en geometrías complejas y fuertemente heterogéneas, pero en 2D. Su extensión a 3D está siendo estudiada pero requerirá una gran cantidad de memoria y tiempos de cálculo. [16]

Como ejemplos de códigos de transporte deterministas tenemos DRAGON [4], WIMS [28], APOLLO [31] y NEWT [6], siendo éste último el manejado en la elaboración de este proyecto, y del que más adelante haremos una somera descripción.

2.1.2. Aplicación estándar

La **aproximación o aplicación estándar** constituye la tendencia más extendida en la generación actual de métodos para el diseño y análisis de núcleos de LWR. Consta de

dos etapas bien diferenciadas, empleando en la primera de ellas un código de transporte y en la segunda uno de difusión, tal y como se puede comprobar en la figura 2.1 donde se muestra un diagrama de flujo del proceso.

La primera etapa está dedicada exclusivamente para realizar cálculos a nivel de celda o a nivel de elemento combustible aislado con un código de transporte en multigrupos. En estos cálculos la discretización en energía suele ser bastante fina, empleándose típicamente varias decenas de grupos de energía (de 30 a 44 grupos), aunque para cubrir mejor el espectro energético de los reactores LWR, se suelen emplear discretizaciones desde 99 hasta 172 grupos energéticos.

Respecto al dominio espacial, estos cálculos se realizan en pocas dimensiones, habitualmente en 2D, tendiendo a hacer aproximaciones basadas en la subdivisión en anillos de las celdas con combustible. Los sectores anulares abarcan las regiones de la pastilla combustible, de la vaina y las regiones donde hay agua como moderador. Los cálculos de transporte sobre el dominio de la celda o del elemento combustible aislado en la mayoría de los casos se realizan imponiendo condiciones de contorno reflectivas.

En ocasiones se emplean dos cálculos de transporte sucesivos, uno para realizar los cálculos de celda (B1 en la figura 2.1) y otro que, tomando los resultados anteriores, emplea una estructura de grupos más gruesa para realizar los cálculos de elemento (B2). Una vez realizado el cálculo de transporte se tiene acceso a las distribuciones del flujo en energía y espacio (2D) que son utilizadas para definir los mapas de potencia por celdas.

La segunda etapa consiste en un cálculo a nivel de núcleo completo mediante un código de difusión nodal (C). Estos cálculos se basan en tablas de secciones eficaces pre-generadas (por los cálculos de transporte) para elementos homogeneizados y condensadas en pocos grupos de energía, típicamente dos. Por tanto, una estructura energética en dos grupos, rápido y térmico, en conjunción con la aproximación de difusión son la clave para resolver el problema del cálculo del núcleo completo, resolviéndose de esta forma la neutrónica del núcleo en la escala nodal.

Después del cálculo de difusión nodal para todo el núcleo se realiza una reconstrucción de la distribución de potencia por barra de combustible. Para esta reconstrucción es necesario guardar los factores de potencia por celda de combustible obtenidos en los cálculos de elemento aislado, combinándolos de alguna manera con la distribución de potencia global de la solución nodal. [20]

Queda justificada de esta forma la necesidad de los códigos de difusión nodales, hecho que podríamos resumir a continuación a modo de corolario: dada la inviabilidad de poder aplicar el transporte directo en 3D acoplado con termohidráulica, debido a las elevadas exigencias de tiempo y nivel de cálculo; se recurre a la aproximación estándar, ejecutando inicialmente códigos de transporte en muchos grupos de energía y pocas dimensiones (2D)

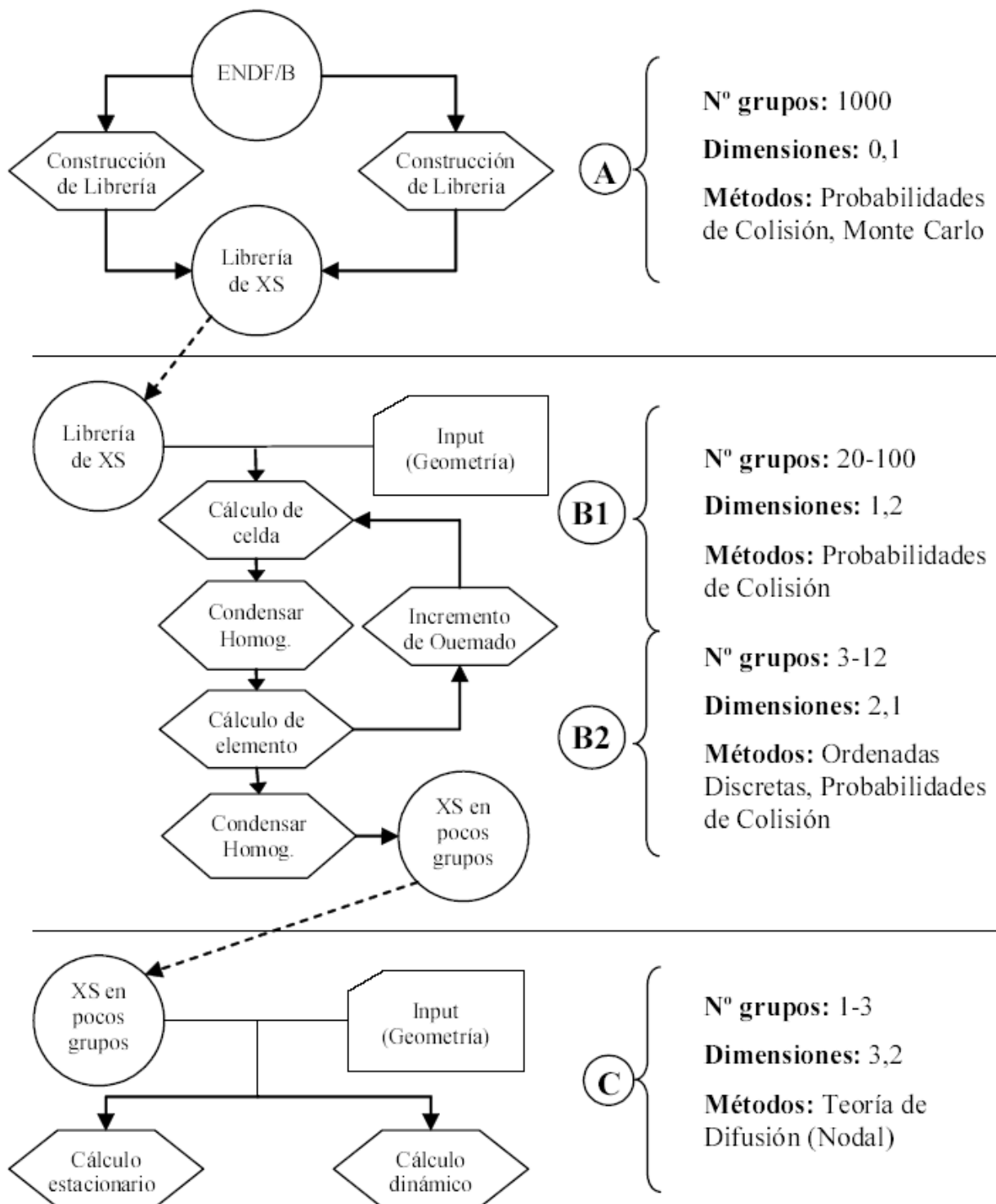


Figura 2.1: Flujo de cálculo estándar en el diseño de núcleos

para a continuación aplicar los códigos de difusión en pocos grupos de energía pero en 3D.

2.2. Códigos de transporte para cálculo de secciones eficaces: códigos *lattice*

Los códigos *lattice* se utilizan para calcular secciones eficaces en pocos grupos de energía en una pequeña unidad del reactor en función de las condiciones locales de operación. Esta pequeña unidad puede ser desde una celda unitaria (conocida como *pin-cell*), un elemento o fracción de un elemento combustible hasta una parte del núcleo. Generalmente, los cálculos *lattice* se efectúan sin conocer exactamente las condiciones de operación fuera de la unidad que está siendo procesada ni los materiales que la rodean. Es por ello habitual asumir que todos los componentes de alrededor de dicha unidad son exactamente iguales. El término *lattice* hace referencia al hecho de que la unidad geométrica básica se repite infinitas veces (la traducción literal es entramado).

En este apartado se pretende describir por encima los elementos y paquetes de cálculo de los que consta un código de este tipo, y describir con algo más de detalle el código NEWT empleado en la elaboración de este proyecto.

2.2.1. Elementos de un código *lattice*

La primera generación de códigos *lattice* estaba basada en la conocida fórmula de los cuatro factores. Estos códigos son una reminiscencia del legado original de la física de reactores y no usan las librerías de secciones eficaces isotópicas tales como la ENDF/B. Vamos a centrar nuestro análisis en la segunda generación de códigos, caracterizados por representar las energías de los neutrones en un elevado número de grupos (entre 50 y 400). Estos códigos están basados en una colección de modelos y algoritmos numéricos ensamblados, tal y como se observa en la figura 2.2. Los componentes principales de un código de este tipo son los siguientes:

- **Librería de acceso e interpolación en temperatura.** Este módulo tiene la capacidad de reconocer el formato de la librería de secciones eficaces isotópicas y reconstruir los datos de los isótopos que se utilizarán en el resto del proceso de cálculo. Los datos nucleares son interpolados respecto a la temperatura absoluta T , asumiendo que las secciones eficaces varían según \sqrt{T} entre los valores tabulados. Este módulo se usa también para identificar el auto-blindaje y el quemado de combustible o desgaste de aleaciones.
- **Cálculo del auto-blindaje de las resonancias.** Los cálculos de auto-blindaje de las resonancias son necesarios para tener en cuenta las depresiones locales en el flujo ponderado en los casos en los que un grupo energético tenga muchas resonancias

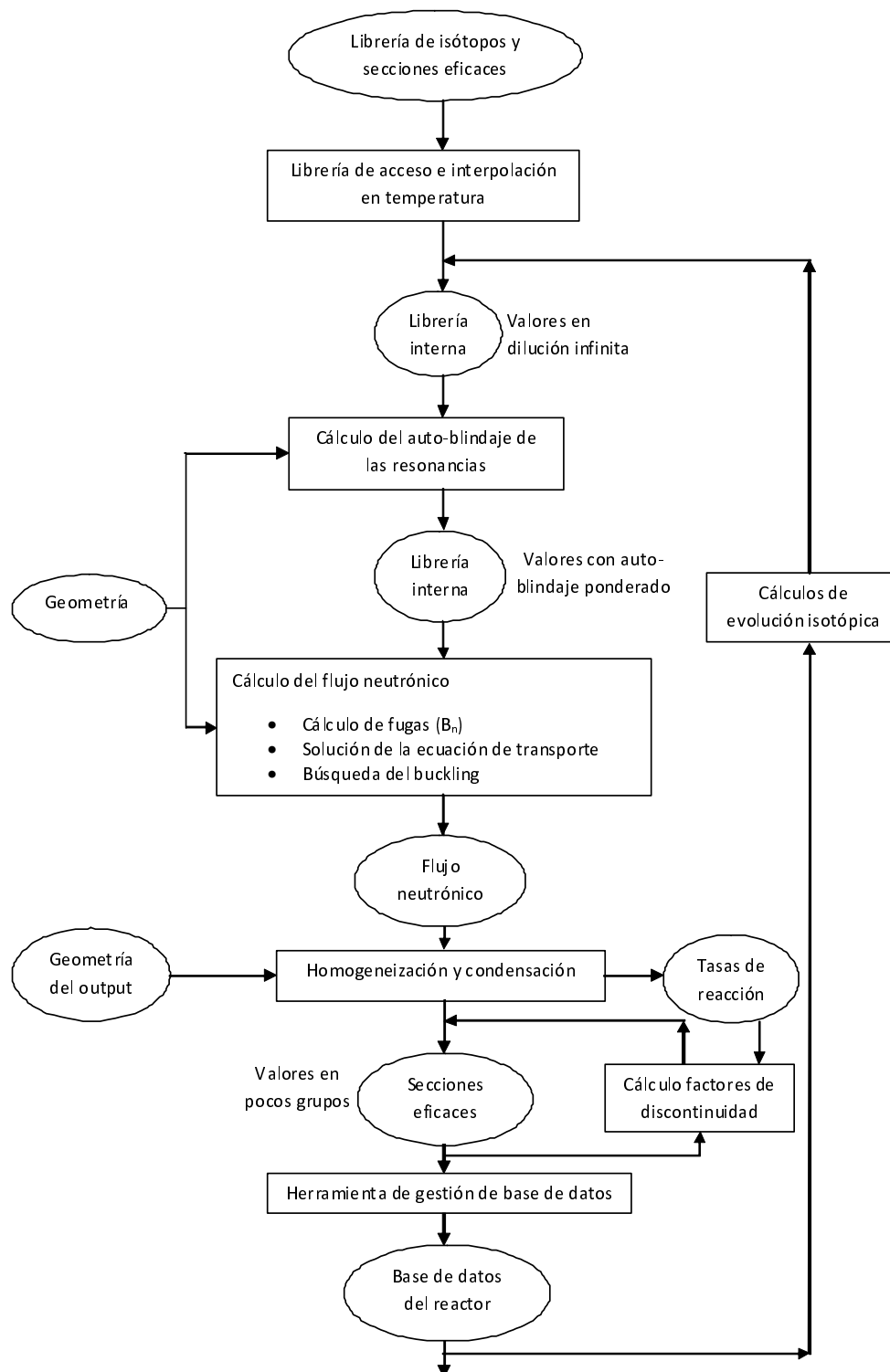


Figura 2.2: Diagrama de flujo para los cálculos *lattice*

en las secciones eficaces. El módulo correspondiente al auto-blindaje es responsable de calcular la dilución equivalente empleada para interpolar la librería de secciones eficaces en cada grupo de energía o de ponderar las secciones eficaces resonantes con una función teniendo en cuenta la depresión producida en el flujo. Estas secciones eficaces son después multiplicadas por unos factores de equivalencia, hallados para tener en cuenta los efectos no lineales de condensación en casos heterogéneos. Como se puede observar en la figura anterior, se suele separar el tratamiento del auto-blindaje del cálculo principal del flujo en multigrupo.

- **Cálculo del flujo principal.** Este módulo es responsable de calcular el flujo neutrónico según la estructura en grupos de la librería, teniendo en cuenta los efectos de las fugas. El algoritmo básico de cálculo suele ser el método de probabilidades de colisión aunque también algunos códigos modernos emplean los MOC. Las tasas de fugas y los coeficientes correspondientes se obtienen usando cálculos específicos denominados cálculos B_n .
- **Homogeneización y condensación.** Los cálculos realizados hasta el momento se han hecho considerando el reactor heterogéneo, es decir considerando separación de materiales de acuerdo a su disposición real en el reactor. Esta propia disposición hace que el flujo neutrónico no sea constante de forma que no todos los materiales “ven” el mismo flujo. Cuando se homogeneiza se sintetizan todos los materiales en uno sólo, de forma que la unidad considerada (celda, elemento combustible,...) queda compuesta por un único material. Este único material tiene que mantener constante la tasa de reacción calculada de acuerdo a la disposición real heterogénea. El flujo sin embargo al hacerlo constante en el caso homogéneo no va a ser el mismo que en el caso heterogéneo, donde hemos visto que no lo es. La condensación es el procedimiento por el cual se colapsan las secciones eficaces y demás parámetros a un número de grupos de energía inferior al que se ha empleado en el cálculo.
- **Cálculo de factores de corrección.** En este módulo se lleva a cabo un cálculo para hallar unos coeficientes o factores de discontinuidad definidos como el cociente entre el flujo heterogéneo y el flujo homogéneo, ambos en la interfaz de la superficie. Estos coeficientes se emplean para poder reconstruir el flujo. Según la teoría de cálculo de los mismos estos coeficientes pueden recibir diferentes nombres, así por ejemplo están los coeficientes GET o Selengut, o también los factores de discontinuidad obtenidos por SPH (superhomogeneisation). Estos coeficientes son los que, introduciéndolos en las ecuaciones correspondientes, obligan a que se conserve la tasa de reacción.
- **Cálculo de la evolución isotópica.** Esta importante capacidad del código *lattice* nos permite tener en cuenta la evolución isotópica de cualquier material (intra-nuclear o extra-nuclear) seleccionándolo en la librería de secciones eficaces de los isótopos. De esta forma se puede evaluar diferentes aspectos tales como el quemado del combustible, el consumo progresivo de las barras de control, la aparición de productos de fisión en el combustible, la transmutación de materiales estructurales (aceros por ejemplo) con motivo de absorciones neutrónicas, etc. Las ecuaciones de formación y decaimiento forman un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de

primer orden que se resuelven para obtener la densidad de núcleos de varios isótopos presentes en el reactor nuclear. [13]

2.2.2. El código NEWT de SCALE

NEWT (New ESC-based Weighting Transport code) es un código de transporte bidimensional que resuelve las ecuaciones mediante el método de ordenadas discretas basado en el denominado planteamiento ESC (Extended Step Characteristic) para la discretización espacial de cualquier estructura mallada. Es un código desarrollado dentro de una Plataforma llamada SCALE [3] (Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation) promovida en Estados Unidos por el Laboratorio nacional de Oak Ridge que también ha elaborado otros 12 paquetes, tales como ORIGEN [2] (para estudiar la evolución isotópica de combustible gastado), TRITON o TSUNAMI (análisis de sensibilidad). Precisamente una de las ventajas de NEWT es el fácil acoplamiento con otros códigos de SCALE, permitiendo enlazar diferentes cálculos con diferentes códigos.

Los códigos de SCALE se clasifican en *módulos funcionales*, *módulos de control* y *utilidades*. Los módulos funcionales incluyen los códigos de física básicos, como XSDRNPM (ordenadas discretas en 1-D), KENO (Monte Carlo en 3-D para análisis de criticidad), NEWT (ordenadas discretas en geometrías arbitrarias de 2-D), ORIGEN (quemado puntual y decaimiento) y muchos otros códigos aplicables a criticidad, blindaje, quemado y transporte de radiación.

Los módulos de control actúan como controladores de secuencia, preparando el input para los módulos funcionales, transfiriendo datos y ejecutando los módulos funcionales en la secuencia adecuada para cada tipo de análisis particular. TRITON [5] (Transport Rigor Implemented with Time-dependent Operation for Neutronic depletion) es un módulo de control de SCALE que se puede utilizar junto con NEWT para el cálculo de transporte en 2-D o para cálculos de quemado en 2-D a través de un acoplamiento de NEWT con ORIGEN.

En cuanto a NEWT, utiliza para la ecuación de transporte una aproximación de ordenadas discretas en un mallado arbitrario, de manera que genera una solución determinista rigurosa y robusta para configuraciones no ortogonales. NEWT emplea un esquema particular (el método característico de paso extendido, ESC) que permite un mallado computacional basado en polígonos arbitrarios. Este mallado se puede usar para aproximar curvas o superficies irregulares con el fin de modelizar problemas que son formalmente difíciles o poco prácticos de modelizar directamente con los métodos de ordenadas discretas. Las dos principales características del método ESC son dos: primero, que en el interior de cada celda computacional (se entiende bajo esta denominación cada celda del mallado, no una celda tipo *pin-cell*. Más adelante, al explicar en el capítulo 4 el input de NEWT se profundiza más en esta cuestión) todas las propiedades, por ejemplo, secciones eficaces y término fuente, son uniformes; y segundo, que las fronteras de una celda están

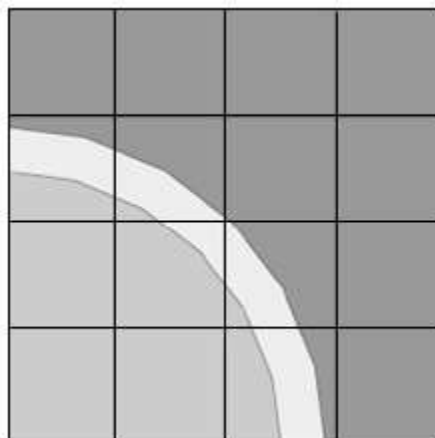


Figura 2.3: Modelización de NEWT para un cuarto de *pin-cell* con un mallado de 4x4

definidas por líneas rectas, que constituyen los polígonos comentados.

En la figura 2.3 se puede observar la modelización para un cuarto de *pin-cell* viendo como el contorno de las superficies es poligonal. Sobre esto no hay ningún tipo de restricción sobre la forma del polígono envolvente o el número de caras que pueda tener, aunque como es obvio el número siempre está limitado y nunca alcanzará a ser una curva. Sobre el primer aspecto se puede comentar que es una pobre aproximación cuando el volumen de la celda es muy grande. Aunque las secciones eficaces son propiedades del material y permanecen constantes en el espacio, el término fuente, que depende del flujo neutrónico, variará con la posición. No obstante, ya que la solución sería exacta en una celda infinitesimal, es de esperar que la aproximación será razonable para celdas computacionales en las que el cambio del flujo (y por tanto del término fuente) es pequeño sobre el dominio de la celda.

El planteamiento ESC fue desarrollado con objeto de obtener una solución mediante el método de ordenadas discretas en geometrías complicadas en las que otros métodos proveen soluciones menos satisfactorias. Las soluciones deterministas a la ecuación de transporte neutrónico generalmente calculan una solución en términos del flujo de partículas, que es el producto de la densidad de partículas por la velocidad, y es una magnitud muy útil para determinar la tasa de reacción, que caracteriza a los sistemas nucleares. Los métodos 2-D de ordenadas discretas trabajan con cálculos que proporcionan cuatro flujos promedio en las caras y un flujo promedio de la celda para cada celda en un problema de mallado regular. Empleando el método ESC se determinan flujos promedio en cada cara de los polígonos del dominio del problema y se usan para determinar el flujo medio de la celda. Este proceso se repite para cada celda del problema, y al igual que en los métodos tradicionales se lleva a cabo una iteración hasta alcanzar una convergencia. Esta flexibilidad geométrica es una mejora sustancial frente a los códigos actuales que proporciona la capacidad de modelar problemas que son muy difíciles o imposibles de modelar directamente.

Más información sobre el método ESC y su implementación en el código NEWT puede

encontrarse en el manual del código[6] o en la página web de SCALE

2.3. Códigos de difusión. Descripción del COBAYA3

Como ya se ha comentado, la resolución mediante métodos numéricos de la ecuación de transporte supone a día de hoy unas necesidades de cálculo que exceden la capacidad de los computadores comunes, requiriendo el empleo de supercomputadores. Para paliar este problema y tratar de reducir su magnitud se recurre a la aplicación de simplificaciones en las discretizaciones.

La simplificación en cuanto a la discretización angular conduce a la ecuación de difusión. El éxito de esta aproximación, cuyo objetivo es eliminar la dependencia angular del flujo, se basa en que el conocimiento del flujo neutrónico escalar es suficiente para la mayoría de las aplicaciones, como por ejemplo las distribuciones de tasas de reacción, por lo que el interés se centra en conocer dicho flujo escalar ($\phi(\vec{r}, E)$) en lugar del flujo neutrónico angular ($\psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$). Esta aproximación conlleva asumir una cuasi-isotropía del flujo, que en ocasiones no será válida e implicará su no utilización.

Para eliminar la dependencia con la energía en la ecuación de difusión, ésta se integra sobre G intervalos en el dominio energético, obteniéndose por tanto G ecuaciones. Estas ecuaciones conforman la denominada ecuación de difusión en multigrupos, y la simplificación realizada en la discretización energética conduce a la llamada aproximación en multigrupos.

Por último, en cuanto a la heterogeneidad del problema, es decir, en el dominio espacial, la simplificación que se hace consiste en una homogeneización que se puede aplicar en dos escalas:

1. Homogeneización de la barra de combustible, definiendo un volumen paralelepípedo de material homogéneo que incluye combustible, vaina y refrigerante circundante, conocido como celda o *pin-cell*.
2. Homogeneización de una fracción axial del elemento combustible o $\frac{1}{4}$ de elemento.

En el primer caso (malla fina) los métodos numéricos más empleados para resolver las ecuaciones son los de diferencias finitas y elementos finitos. En el segundo caso (malla gruesa), desde los años 70 los métodos más extendidos son los llamados métodos nodales.

No es el objetivo de este proyecto hacer una enumeración ni explicación de todos los tipos de métodos nodales que hay, ya que excede el alcance y temática del proyecto. Hay numerosas publicaciones, especialmente Tesis Doctorales, elaboradas en el Departamento de Ingeniería Nuclear de la ETSII, que estudian y profundizan en cada uno de ellos. Por

ello aquí nos limitaremos simplemente a describir por encima las características del código COBAYA3. [14]

El código COBAYA3 ha sido diseñado para proporcionar herramientas computacionales necesarias para cálculos de núcleos en ambos niveles: nodal y *pin-by-pin*. Es la evolución del código previo COBAYA2-SIMULA que era capaz de proporcionar soluciones 2D *pin-by-pin* y soluciones de núcleo completo 3D en dos grupos de energía. [1]

COBAYA3 permite realizar cálculos de difusión cinéticos en multigrupos de la distribución de potencia teniendo en cuenta los efectos de realimentación termo-hidráulica sobre las secciones eficaces. Todos estos cálculos pueden ser realizados sin ninguna limitación en cuanto al tamaño y dimensión de los parámetros (número de grupos de energía, dimensiones, etc.). Los dos *solvers* disponibles en el código son:

1. El *solver* COBAYA *pin-by-pin* que está basado en la formulación de diferencias finitas en malla fina (fine mesh) para cálculos de difusión en multigrupos en geometría cartesiana tridimensional. Utiliza factores de discontinuidad (teoría GET, más adelante, en el capítulo 3 se explica) para corregir la solución de transporte y los efectos debidos a las heterogeneidades. En el código se implementan diferentes condiciones de contorno (reflectiva, simétrica, flujo cero en la superficie, de vacío, albedo, ...). Emplea la técnica de disecciones alternadas que divide la geometría del núcleo en cuartos de elementos combustibles, incluyendo toda la longitud axial para poder tener en cuenta el acoplamiento termo-hidráulico. Estos cuartos de elemento pueden agruparse siguiendo cuatro disecciones alternativas formadas por elementos combustibles (1 *color-set*), por cuartos de elementos vecinos (4 *color-set*), o por combinaciones de mitades de elementos en las direcciones horizontal y vertical (2 *color-set*). COBAYA permite la resolución tanto de estados estacionarios como de transitorios. Además supone uno de los primeros trabajos que trata el acoplamiento de neutrónica y termo-hidráulica a la escala de la celda/subcanales, para la resolución en 3D de núcleos LWR a plena potencia. Para ello se emplea el código TH de subcanales COBRA-TF [24, 29].
2. El *solver* ANDES [21] es un método nodal basado en la formulación ACMFD (Analytic Coarse-Mesh Finite-Differences). Puede aplicarse en cálculos de difusión en multigrupos tanto en geometría cartesiana como triangular-Z. También utiliza como corrección del flujo los factores de discontinuidad obtenidos por la teoría GET para tener en cuenta las heterogeneidades intra-nodales. Por último, puede aplicar las mismas condiciones de contorno que en el *solver pin-by-pin*.

El método de resolución para los cálculos cinéticos está basado en un esquema de discretización de los pasos de tiempo implícito, tanto para las ecuaciones de difusión como las de concentración de precursores de neutrones diferidos. Para el *solver* nodal, el método de extrapolación exponencial también está implementado para permitir el incremento de los pasos de tiempo cuando las condiciones neutrónicas del núcleo evolucionan lentamente.

En el *solver pin-by-pin* tanto el esquema de discretizaciones de Euler y de Crack-Nicholson están implementados para poder alargar los pasos de tiempo.

Las condiciones termo-hidráulicas del núcleo/elemento pueden ser modeladas de una manera simple dentro de COBAYA3 empleando una fórmula de acumulación de entalpías para cada canal o sub-canal sin considerar los flujos cruzados ni interpolar en los polinomios de densidad y temperatura. Pero también puede ser tratado de una forma más rigurosa y precisa usando el código COBRA-IIIC [15] acoplado con el propio COBAYA3. También, dentro de la plataforma elaborada por NURESIM, SALOME [25] el acoplamiento está permitido con el código termo-hidráulico FLICA4 [30] para su uso en cálculos nodales de núcleo. Estos acoplamientos tienen un papel muy importante que jugar en el estudio de situaciones de emergencia tales como la rotura de una línea principal de vapor o casos de eyección de barras de control.

Es posible igualmente introducir como un input las propiedades termo-hidráulicas del refrigerante en la entrada del núcleo simular transitorios así como tablas con propiedades térmicas para poder considerar la potencia residual.

El código nodal ANDES ha sido verificado numéricamente tanto en geometría cartesiana como triangular-Z y comparado con los resultados de los benchmarks internacionales de la NEA: eyección de barras de control, retirada de barras de control, rotura de una línea principal de vapor, benchmarks de transitorios de núcleos de $UO_X - MOX$ y benchmarks de VVER-CT. [18, 17]

El *solver pin-by-pin* ha sido también verificado y contrastado con las secciones eficaces de las celdas de $UO_X - MOX$ provistas en los respectivos benchmarks.

Capítulo 3

Descripción de librerías de secciones eficaces para cálculos de difusión

Los datos necesarios para los cálculos de difusión nodales son varios. Como ya se ha comentado en capítulos anteriores, estos datos son obtenidos por códigos de transporte deterministas o códigos *lattice* y se dan para nodos homogeneizados, almacenados en unos archivos llamados librerías. Hay que destacar que estas librerías no son las librerías genéricas de datos nucleares en formato ENDF (tales como la ENDF/B o la JEFF), sino que se trata de los datos homogeneizados únicamente necesarios para su utilización en cálculos nodales. En el presente capítulo se lleva a cabo una descripción de los diferentes tipos de librerías clasificándolas en dos grupos: parametrizadas y tabuladas. También se hace una revisión de cuáles son los parámetros almacenados más importantes explicando su importancia a partir de la ecuación de difusión con dependencia temporal.

3.1. Almacenamiento de Datos Nucleares: Librerías

Para resolver las ecuaciones de difusión neutrónicas el núcleo del reactor se divide en elementos prismáticos volumétricos denominados nodos. El área de la base de estos prismas está determinada por la geometría (cuadrada o hexagonal) de los elementos combustibles. La división axial del núcleo en diferentes capas define la altura de los prismas. Para los cálculos neutrónicos se requiere una serie de datos nucleares homogeneizados para cada nodo. Los datos neutrónicos homogeneizados y en varios grupos de energía, como por ejemplo, coeficientes de difusión promedio para cada nodo, secciones eficaces, factores de discontinuidad, datos concernientes a los venenos neutrónicos o a los neutrones diferidos, etc. son generados por los códigos *lattice* y compilados en librerías de datos que pueden ser usadas en los inputs de los códigos nodales, tales como ANDES de COBAYA3 o DYN3D.

Estas librerías deben contener las series de datos neutrónicos en multigrupos de energía para los tipos de elementos combustible utilizados, que están caracterizados por el enriquecimiento en U-235, el contenido en MOX, la presencia o ausencia de absorbentes

consumibles y la presencia o no de barras de control. Así mismo, son necesarios también los datos para los reflectores del núcleo del reactor homogeneizados para su geometría respectiva.

Al igual que en los inputs de los códigos de difusión, los datos neutrónicos tienen que ser específicos para la composición del elemento combustible considerado, el quemado del nodo, y las condiciones reales y actuales de operación, caracterizadas por los valores promedio en los nodos de:

- Temperatura del combustible
- Temperatura del moderador
- Concentración de boro en el moderador
- Densidad del moderador

En este sentido, los diferentes tipos de librerías que se utilizan, y que están relacionadas entre sí son las siguientes:

1. **Librerías multi-dimensionales tabuladas:** Las secciones eficaces se representan en tablas multidimensionales. La librería contiene para cada tipo de elemento combustible las secciones eficaces macroscópicas de transporte (o el coeficiente de difusión), absorción, ν -fisión, κ -fisión y dispersión en los adecuados puntos de quemado. Los factores de discontinuidad y factores de potencia por barra también pueden ser incluidos en la librería.

La dimensión de la tabla viene determinada por el número de variables considerado. Además del quemado, suelen considerarse cuatro variables de realimentación: temperatura de combustible, temperatura del moderador, concentración de boro en el moderador y densidad del mismo. Se almacenan para cada combinación de variables los valores de los parámetros. Después los datos en cada nodo pueden calcularse mediante una interpolación multidimensional. La exactitud de este método crece con la densidad de “puntos de datos” (*data-points*) producidos por los cálculos del código lattice. El efecto de los venenos neutrónicos muchas veces puede venir incluido de forma implícita en las secciones eficaces. En ese caso, este tipo de datos no puede ser empleado en diferentes estados de potencia (por ejemplo HFP y HZP). Por esta razón, los venenos neutrónicos pueden ser incluidos explícitamente dentro de la librería como una variable más.

Resulta bastante intuitivo percibir que este tipo de librerías requieren una capacidad de almacenamiento elevada, para poder memorizar las diferentes combinaciones de valores que cubran un amplio rango de posibilidades de operación.

2. **Librerías parametrizadas:** Son el objeto fundamental de estudio del presente proyecto. La idea básica de la parametrización consiste en reproducir el valor de

una sección eficaz conocidas las condiciones de operación en vez de almacenar todos los valores. Según cómo se lleve a cabo la parametrización de las secciones eficaces y otros parámetros en función de las variables pueden distinguirse distintos tipos de librerías. Entre ellas destacamos:

- a) **Librerías con parametrización factorizada** En este tipo de librerías los datos neutrónicos se representan de la forma:

$$\Sigma(Q, T_{fuel}, T_{mod}, C_B, \rho_{mod}) = \Sigma_{base}(Q) \cdot K_{T_{fuel}}(Q) \cdot K_{T_{mod}}(Q) \cdot K_{C_B}(Q) \cdot K_{\rho_{mod}}(Q)$$

donde Σ_{base} representa la sección eficaz en las condiciones nominales de operación dependiendo del quemado Q . Los términos siguientes representan las correcciones correspondientes a la diferencia entre las condiciones nominales y las reales en el núcleo. Se trata de polinomios de más de segundo grado (o funciones con raíces cuadradas en el caso de T_{fuel}) donde los coeficientes de estos polinomios también dependen del quemado. Como quiera que sea, este método no tiene en cuenta los efectos cruzados entre variables realimentadas. Esto provoca altas imprecisiones en el caso de transitorios con largas desviaciones frente a las condiciones nominales.

- b) **Librerías con aproximación de primer orden:** Estas librerías, ampliamente utilizadas, se elaboran de acuerdo a una parametrización en la que cada sección eficaz es evaluada como una suma de un valor base más una desviación local o parcial en torno a ese valor de referencia. Las secciones eficaces base representan la dependencia con el quemado en condiciones locales de referencia, mientras que las derivadas parciales de las secciones eficaces representan su dependencia instantánea respecto a la variación en las condiciones locales. La representación sería la siguiente:

$$\begin{aligned} \Sigma(Q, T_{fuel}, T_{mod}, C_B, \rho_{mod}) = & \Sigma_0(Q) + \frac{\partial \Sigma}{\partial T_{fuel}}(T_{fuel} - T_{fuel,0}) + \frac{\partial \Sigma}{\partial T_{mod}}(T_{mod} - T_{mod,0}) + \\ & + \frac{\partial \Sigma}{\partial C_B}(C_B - C_{B,0}) + \frac{\partial \Sigma}{\partial \rho_{mod}}(\rho_{mod} - \rho_{mod,0}) \end{aligned}$$

Esta aproximación da buenos resultados cuando las desviaciones son pequeñas y el nuevo valor de la sección eficaz se mantiene en el entorno próximo del valor de referencia.

Tanto en el caso anterior como en este tipo de librería de datos, se realiza una interpolación lineal sobre los pasos de quemado. Las variables de operación: densidad del moderador, concentración de boro y temperaturas del combustible y moderador, varían independientemente del resto en los cálculos aislados

para cada caso particular de quemado. Una variación independiente significa que tres de las variables permanecen fijas en sus valores nominales mientras que la restante va tomando diferentes valores. Los datos resultantes se registran y constituyen la base de datos de la parametrización. Esta metodología es utilizada a menudo en la tecnología nuclear. Sin embargo, hay efectos minoritarios del espectro neutrónico (que cambia debido a la variación de condiciones de operación) que pueden perturbar las secciones eficaces macroscópicas.

- c) **Librerías con parametrización polinómica:** Este tipo de librería también ha sido mencionado al explicar las precedentes. En este caso, cada sección eficaz se expresa como un polinomio multivariante en el que cada incógnita es precisamente una variable local de operación. Los grados son diferentes dependiendo de cada variable, puede haber hasta grado 2 en una variable, por ejemplo la densidad, y en el resto ser únicamente de grado 1 o incluso raíces cuadradas en el caso de la temperatura del combustible. Los efectos cruzados entre dos variables se expresan como el producto de las mismas (producto de tres términos en el caso de efecto cruzado entre tres variables). El valor de cada coeficiente se obtiene realizando ajustes estadísticos mediante técnicas de mínimos cuadrados. Este tipo de librería reproduce fácilmente los valores de los parámetros funcionalizados y su validez no se extiende únicamente al entorno del valor de referencia, que puede ser el término independiente, sino que también es válido para mayores desviaciones. Respecto al quemado hay que reseñar que en este método se trata como una variable de interpolación, teniendo que realizar un ajuste polinómico para cada paso de quemado, no se incluye como una variable más. De manera que para cada paso de quemado se tiene un polinomio de ajuste. La formulación matemática de este modelo es por tanto la siguiente:

$$\begin{aligned} \Sigma(T_{fuel}, T_{mod}, C_B, \rho_{mod}) = & a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + \dots + b_1C_B + \dots + c_1T_{mod} + \dots + d_1T_{fuel} + \\ & + \dots + k_1\rho \cdot C_B + k_2\rho \cdot T_{mod} + \dots + k_iC_B \cdot T_{mod} + \dots + k_jT_{mod} \cdot T_{fuel} + h_1\rho \cdot C_B \cdot T_{mod} + \dots \end{aligned}$$

Sobre la anterior clasificación de librerías de datos nucleares cabe concluir que el tipo de librería fundamental en el que se va a centrar el estudio a partir de ahora es la librería parametrizada.

3.2. Datos nucleares necesarios en cálculos de difusión

Como se acaba de ver, una librería es un inmenso almacén de datos, que por sí solos no indican nada sino que se necesitan para realizar los análisis tridimensionales del núcleo de un reactor. Por tanto cabe preguntarse cuáles son exactamente los datos que se van a guardar en la librería y cuál es el papel que juegan en la neutrónica. Las ecuaciones fundamentales en todo el proceso son la ecuación de difusión en multigrupos con dependencia temporal que rige el transporte de los neutrones y las ecuaciones que establecen el

balance de los precursores de neutrones diferidos. Ambas las recogemos a continuación, para ilustrar de alguna forma los datos y magnitudes más representativos:

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial \phi_g}{\partial t} = -\nabla \cdot J_g - \Sigma_{r,g} \phi_g + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g'} + (1 - \beta) \chi_p^g \sum_{g'=1}^G \frac{\nu \Sigma_{f,g'}}{k_{eff}} \phi_{g'} + \sum_{k=1}^{G_d} \chi_{d,k}^g \lambda_k C_k + S_{g,ext}$$

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = f_k \beta \sum_{g=1}^G \frac{\nu \Sigma_{f,g}}{k_{eff}} \phi_g - \lambda_k C_k \quad k = 1, \dots, G_d$$

En la ecuación de difusión se hace distinción entre neutrones inmediatos (p) y diferidos (d). G denota el número de grupos de energía y G_d el número de precursores de neutrones diferidos (6 en la mayoría de las veces). Además de las secciones eficaces aparecen otra serie de parámetros cinéticos, que más adelante se explican, como las λ_k o constantes de desintegración característica de cada grupo, β o fracción de neutrones diferidos y $\chi_{d,k}^g$ que representa el espectro de los neutrones diferidos del grupo de precursores k). $C_k(t, \vec{r})$ es la concentración del k -ésimo grupo de precursores. En cada ecuación de balance de éstos f_k representa la fracción de fisiones que dan lugar a precursores del grupo k respecto a las fisiones que dan lugar a precursores de todos los grupos.

A continuación pasamos a explicar con detenimiento cada uno de los datos que intervienen, comenzando por aquellas magnitudes fundamentales en todos los cálculos de la ingeniería nuclear que son las secciones eficaces. Posteriormente se explican los factores de discontinuidad, que aunque no salen de manera explícita en las ecuaciones anteriores son vitales para corregir el flujo neutrónico; y finalmente se termina con el resto de parámetros, haciendo más hincapié en los cinéticos.

3.2.1. Secciones Eficaces

La comprensión de los procesos que ocurren en el seno de un reactor nuclear está fundamentalmente determinada por la comprensión y el conocimiento de las secciones eficaces de los principales procesos implicados. Sin este conocimiento resulta imposible entender el por qué de muchas de las decisiones de diseño que se deben tomar sobre la especificación de los materiales constituyentes del reactor y sobre el espectro neutrónico del reactor que hay que conformar para obtener la mejor economía neutrónica. Estas secciones eficaces dependen de la energía de los neutrones, lo que hace indispensable conocer los valores y tendencias de cada una en diferentes zonas del espectro energético. Por ello, considerando los procesos más importantes que tienen lugar en un reactor nuclear, las secciones eficaces que siempre deben ser almacenadas en librerías para su empleo en el diseño y evaluación del reactor son las siguientes:

- **Sección eficaz de fisión:** La reacción de fisión nuclear permite que en el seno de un reactor nuclear se produzca una multiplicación neutrónica que permite la posibilidad de mantener una reacción en cadena de manera sostenida. Para ello, uno o

más neutrones de los producidos en el proceso de fisión nuclear deben ser capaces de producir en la siguiente generación un nuevo proceso de fisión, completando así un ciclo neutrónico. La fisión consiste en la escisión de un núcleo pesado en dos o tres núcleos más pequeños junto con la emisión de dos o tres neutrones. Esta escisión se produce con motivo de la absorción de un neutrón por parte de un núcleo fisible como puede ser el U-235 o el Pu-239. El tiempo transcurrido entre la absorción y la fisión es de unos 10^{-14} segundos. Los neutrones que nacen lo hacen con una energía media de 2 MeV, es decir, nacen como neutrones rápidos.

La reacción de fisión sólo se da en los actínidos más pesados, y sus secciones eficaces presentan un comportamiento distinto para el caso de nucleidos fisibles y fértiles. Estos últimos sólo manifiestan fisión por encima de una energía umbral del neutrón incidente, por lo que se denominan fisiones rápidas. Los nucleidos fisibles presentan una sección eficaz, sobre todo en el rango térmico, con una forma típicamente $1/v$ (siendo v la velocidad del neutrón), apareciendo subsiguientemente resonancias a partir del campo epitérmico aunque quedan indiscernibles a partir de unos 400 eV. El valor de la sección eficaz va decreciendo paulatinamente a lo largo del espectro neutrónico de tal manera que en la zona rápida su valor es aproximadamente la centésima parte del valor de la sección eficaz de fisión térmica.

Ligados al proceso de la fisión nuclear, y por ello a su sección eficaz, existen una serie de parámetros de suma importancia, esenciales para los cálculos del diseño del reactor. Tales parámetros son, por ejemplo, el número medio de neutrones nacidos en cada fisión, representado por la letra griega ν y que suele adoptarse como valor promedio en reactores comerciales de agua ligera 2.5. Otro parámetro a considerar es la energía liberada en cada reacción de fisión, que se suele generalizar en torno a 200 MeV, y que se representa por la letra κ . Y también son importantes los denominados rendimientos de fisión para cada nucleido, γ , que se definen como la probabilidad de obtener un núcleo resultante del nucleido considerado tras la fisión del núcleo fisible. Esto adquiere mayor relevancia cuando se estudia la presencia de los venenos neutrónicos obtenidos como productos de fisión (por ejemplo el Xe-135 o el Sm-149) y su influencia en el ciclo neutrónico como absorbentes de neutrones. Mediante los rendimientos de fisión de estos nucleidos podemos conocer cuál es la tasa de formación de los mismos, y actuar en consecuencia sobre los sistemas de control.

En numerosas ocasiones se suele incorporar a la librería el producto $\nu \cdot \Sigma_{fis}$ o $\kappa \cdot \Sigma_{fis}$ en vez de incluir la sección eficaz de fisión. De esta forma se tienen incluidos estos parámetros que, como ya se ha visto, tienen una especial influencia en los cálculos y ecuaciones.

- **Sección eficaz de absorción:** El término absorción hace referencia a uno de los procesos por los que puede desaparecer un neutrón en un ciclo neutrónico. En este sentido los neutrones nacen gracias a la reacción de fisión y desaparecen o bien por

que se fugan, saliendo del sistema, o bien porque son absorbidos en determinados materiales. Esta absorción puede dar lugar a una nueva reacción de fisión posibilitando con ello la multiplicación neutrónica, o ser capturado sin más en materiales estructurales, de control o en el propio combustible. Por ello dentro de la absorción se engloban la fisión y las capturas. Debido a su importancia, la sección eficaz de fisión se ha comentado en un punto aparte, reseñando aquí algunos aspectos sobre la captura neutrónica.

La característica más notable de las secciones eficaces de esta reacción es que su valor es mucho mayor a bajas energías que a energías intermedias o altas. Esto es válido desde el hidrógeno, que tiene sección eficaz de captura despreciable por encima del rango térmico, y ligeramente apreciable en el rango térmico, hasta el combustible nuclear, donde la captura de neutrones térmicos en los diversos nucleidos es más significativa y mucho más importante que la de los neutrones rápidos.

En este último caso se da, no obstante, otra peculiaridad adicional de fundamental trascendencia para el comportamiento neutrónico de los reactores nucleares. Esta peculiaridad es la existencia de resonancias de captura en la zona intermedia de energías en casi todos los nucleidos pesados, pero particularmente en el uranio-238, que es el nucleido más abundante en el combustible de los reactores comerciales actuales. Las resonancias del U-238 se extienden desde los 6 eV hasta los 4.5 keV aproximadamente dando lugar a rangos en las que la sección eficaz de captura es muy alta. Este rango energético que abarca desde la zona epitérmica hasta la zona intermedia de energías neutrónica presenta un dominio fortísimo de la reacción de captura. Estas capturas son denominadas fértiles porque el núcleo resultante va decayendo por desintegraciones beta y aparece plutonio-239 que es un isótopo fisible.

En definitiva, del análisis de secciones eficaces de captura neutrónica de los distintos nucleidos la conclusión que puede obtenerse es que existe una zona energética altamente perjudicial para el mantenimiento de una población neutrónica libre en el reactor, y esta zona energética viene señalada por las resonancias del U-238. Esto implica que para diseñar un reactor nuclear térmico se exige una moderación fuerte de los neutrones hasta alcanzar esta zona energética térmica en la cual la fisión del U-235 presenta características dominantes por su alto valor de sección eficaz, aún cuando tenga que competir con las capturas generalizadas de todos los productos, incluido el hidrógeno y los productos de fisión.

- **Sección eficaz de dispersión:** La dispersión elástica juega un papel fundamental en los reactores nucleares puesto que permite ralentizar los neutrones de fisión, que aparecen como ya se ha comentado con energías del orden de 2 MeV. Para ello, es necesario que los núcleos que tengan la función de ralentizar o moderar los neutrones sean ligeros, pues la pérdida de energía en choques con núcleos pesados es muy pequeña, y no se llevaría a efecto eficientemente el proceso de moderación.

La dispersión elástica interesa en nucleidos ligeros, que exhiben una sección eficaz con un perfil considerablemente simple. Tal es el caso del hidrógeno, e incluso del carbono, siendo este último el moderador más pesado de cuantos se utilizan, con una masa atómica igual a 12. Se aprecia un amplio rango energético a partir del rango térmico e incluyendo éste, en el cual la sección eficaz elástica es prácticamente constante, hasta alcanzar la zona de aproximadamente 1 MeV. A partir de ahí la sección eficaz disminuye de valor, y en el caso de los moderadores más pesados, como el carbono, aparecen anchas resonancias en la zona más elevada, por encima de 2 MeV, típicas de la dispersión inelástica. En el caso del hidrógeno, cuya estructura es la más simple, dichas resonancias ni siquiera hacen su aparición. Mencionando también el oxígeno por acompañar al hidrógeno y deuterio en la formación de sus correspondientes óxidos (agua ligera y agua pesada), éste manifiesta una estructura parecida a la del carbono 12, aunque su primera resonancia aparezca a una energía sensiblemente menor.

Conviene decir que las secciones eficaces de dispersión elástica son de considerable dificultad de medida experimental, si se tiene en cuenta que hace falta conocer la distribución angular de los neutrones emitidos, lo cual requiere montajes experimentales complejos que cubran la práctica totalidad de los 4π estereorradianes de posible salida del neutrón emergente. Por fortuna, las dificultades de observación experimental son paliables en gran medida mediante el uso de la teoría cuántica de la dispersión elástica.

El almacenamiento de las secciones eficaces de dispersión en librerías de varios grupos de energía, se hace en matrices de dispersión, donde $\Sigma_{s;1 \rightarrow 2}$ significa sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 2, $\Sigma_{s;2 \rightarrow 1}$ significa dispersión del grupo 2 al 1, y $\Sigma_{s;1 \rightarrow 1}$ significa sección eficaz de dispersión dentro del grupo 1.

- **Sección eficaz de transporte:** El significado físico de esta sección eficaz es menos intuitivo que en el caso de las anteriores. Su importancia radica en la relación intrínseca que hay entre la sección eficaz de transporte y otros parámetros que influyen en la ecuación de difusión tales como el coeficiente de difusión o el recorrido cuadrático medio. El inverso de la sección eficaz de transporte es el recorrido libre medio de transporte que da una idea de la penetración de los neutrones en un medio a través de las colisiones elásticas.

Realizando un análisis del fenómeno de la dispersión elástica en el sistema laboratorio se llega a la conclusión de que la dispersión no es isótropa, ya que las probabilidades de que un neutrón emerja hacia atrás son menores que en el caso de que lo haga hacia adelante. Ello hace que el neutrón tenga mayor penetración respecto de la dirección inicial de marcha. Esta es la razón por la que se define el recorrido medio de transporte en un medio como $\lambda_{tr} = \lambda_s \frac{1}{1-\bar{\mu}}$ siendo $\bar{\mu}$ el coseno del ángulo medio de dispersión. Si en el medio también se producen absorciones se define la sección

eficaz de transporte como $\Sigma_{tr} = \Sigma_a + \Sigma_s(1 - \bar{\mu})$, cuya relación con el coeficiente de difusión es $D = \frac{1}{3\Sigma_{tr}}$. [22]

3.2.2. Factores de discontinuidad

La idea básica de la homogeneización es reemplazar los nodos heterogéneos por otros homogéneos, de forma que el cálculo del sistema homogeneizado preserve los valores medios que se obtendrían de la solución hipotética del sistema heterogéneo original con un método de más alto orden. Como esta solución no es conocida, se tienen que determinar parámetros homogeneizados de un problema de referencia cuya solución sea próxima a la real, que suele ser un cálculo de elemento con condiciones de contorno de corriente neta nula.

Sin embargo, no es posible que el cálculo homogéneo preserve todos los detalles del heterogéneo. Aunque se recalcularan las constantes en multigrupos con el espectro y condiciones de contorno obtenidas del cálculo completo del sistema heterogéneo, la solución de la ecuación homogeneizada no sería capaz de reproducir los valores medios de referencia. Ello es debido a que la imposición de continuidad del flujo y corriente a través de las interfases es demasiado restrictiva para permitir la preservación simultánea de los flujos medios, tasas de reacción y corrientes del problema heterogéneo. La idea entonces es introducir unos factores de corrección del flujo en las interfases nodales, de forma que se permita que el flujo homogéneo sea discontinuo en dichas interfases y así el cálculo del sistema homogéneo pueda reproducir los valores medios del problema de referencia.

Esos factores de corrección no sólo tienen en cuenta los efectos de homogeneización, también tienen en cuenta las demás aproximaciones implícitas en un cálculo de difusión nodal, es decir, efectos de condensación, efectos de malla gruesa y efectos de transporte.

- Los efectos de condensación energética proceden de colapsar desde los 40-100 grupos usados típicamente por los códigos *lattice* a un número reducido de grupos (típicamente de 2 a 8 grupos para cálculos de LWR) para los cálculos de difusión del núcleo completo. Esa condensación conlleva una pérdida de precisión de la dependencia espectral.
- Los efectos de malla gruesa engloban los errores asociados a la discretización espacial.
- Los efectos de transporte involucran los errores producidos al introducir simplificaciones para pasar de la ecuación de transporte a la de difusión. Es bien sabido que la aproximación de difusión no es precisa en zonas donde hay un fuerte gradiente del flujo. En un cálculo típico de núcleo, estas zonas son las fronteras con el reflector, zonas próximas a materiales fuertemente absorbentes (una barra de control insertada) o cuando dos elementos muy diferentes se ubican uno junto al otro (por ejemplo un elemento de UO_2 y otro de MOX).

A la hora de calcular estos factores de corrección existen varios métodos, siendo la denominada Teoría de Equivalencia Generalizada GET (*Generalized Equivalence Theory*) y el

método de superhomogeneización (SPH) los más extendidos.

Los factores de discontinuidad (IDF, *Interface Discontinuity Factors*) basados en GET son la opción más común para corregir el compendio de errores implícitos en los cálculos de difusión nodales. Se definen como el cociente del flujo heterogéneo en la frontera ϕ_S^{het} , que es el obtenido por la solución de la ecuación de transporte; y el flujo homogéneo ϕ_S^{hom} , obtenido de la solución de difusión.

$$f_G = \frac{\phi_S^{het}}{\phi_S^{hom}}$$

Estos factores intervienen en las ecuaciones discretizadas en los términos de la corriente como un parámetro adicional, respetando los valores calculados de las secciones eficaces y manteniendo las tasas de reacción inalteradas. A nivel nodal, la definición de los factores GET por grupo de energía nos lleva hasta una matriz G por G diagonal para cada nodo, donde los elementos de la diagonal son los IDF.

$$|\phi_g^{het}\rangle_{\pm \frac{h}{2}} = F_d |\phi_g^{hom}\rangle_{\pm \frac{h}{2}} = \begin{bmatrix} f_{g,1} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & f_{g,G} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_{g,1}^{hom} \\ \vdots \\ \phi_{g,G}^{hom} \end{bmatrix}$$

En un cálculo de elemento aislado, con corriente neta nula, el perfil de la distribución de flujo homogéneo sería plano, de forma que el flujo homogéneo en la interfase es igual al flujo medio de la solución de transporte heterogénea de elemento aislado. El factor correspondiente se denomina Single Assembly Discontinuity Factor (ADF) y puede ser computado directamente a partir de la solución de transporte como el cociente de los flujos de interfase y medio:

$$J^{het} = 0 \implies \phi_s^{hom} = \bar{\phi}_g^{het} \implies f_{SADF} = \frac{\phi_s^{het}}{\bar{\phi}_g^{het}}$$

Otra opción para calcular estos factores es usar el método SPH, que perturba el sistema de secciones eficaces para conservar tanto las tasas de reacción como las corrientes de neutrones de una celda o nodo hacia el vecino; resultando un proceso más complejo al introducir una parametrización zonal del entorno que afecta a las secciones eficaces. Las tasas de reacción promedio se mantienen constantes introduciendo un factor multiplicativo en las secciones eficaces, μ , el cual tiene que ser obtenido mediante un procedimiento iterativo usando la formulación del sistema homogéneo. No contiene una dependencia direccional haciendo más difícil su uso en la discriminación del entorno.[11]

$$\tilde{\Sigma} \cdot \bar{\phi}^{hom} = \Sigma \cdot \bar{\phi}^{het}$$

$$\tilde{\Sigma} = \mu \cdot \Sigma$$

$$\mu = \frac{\bar{\phi}^{het}}{\bar{\phi}^{hom}}$$

3.2.3. Otros parámetros

3.2.3.1. Espectro de Fisión

En general, se utiliza el concepto de espectro neutrónico ($\chi(E)$) del reactor para denominar a la distribución de energías de los neutrones libres que existen en el seno del reactor. Esta distribución estadística tiene una importancia extraordinaria, puesto que las probabilidades y modos de interacción de los neutrones con los núcleos dependen fuertemente de la energía cinética de los neutrones incidentes. El espectro neutrónico de un reactor vendrá fuertemente condicionado por la composición material que tenga éste, en tanto que las interacciones de los neutrones con los núcleos y los efectos de éstas en las velocidades de los neutrones dependen de los nucleidos que conformen el reactor. Será muy distinto tener o no tener materiales ligeros, por ejemplo, dados los diferentes efectos en la dispersión elástica. En todo caso, el punto de arranque de los cálculos sobre el espectro neutrónico del reactor es el espectro neutrónico de los neutrones emergentes de la fisión nuclear, puesto que esta es la fuente de neutrones libres. La distribución energética de los neutrones inmediatos de fisión se muestra en la siguiente figura:

La energía cinética media correspondiente a esta distribución está en el valor de 2 MeV. La energía cinética máxima con la que aparecen los neutrones de fisión es de 10 MeV. Se puede establecer en este nivel energético el corte del espectro neutrónico en un reactor, puesto que por encima de este nivel es prácticamente imposible encontrar un neutrón libre. Asimismo cabe señalar que la energía mínima de un neutrón inmediato de fisión es de unos 100 keV. De esta forma, todos los neutrones nacidos de fisión están comprendidos en las dos décadas de energía que van de 0.1 MeV a 10 MeV, siendo la energía cinética media de 2 MeV, como ya se ha dicho.

3.2.3.2. Parámetros cinéticos: fracción de neutrones diferidos, constantes de decaimiento e inverso de la velocidad

Como es bien sabido, una pequeña fracción de los neutrones que aparecen libres en el reactor no emergen directamente de la reacción de fisión en sí, sino como consecuencia de unas desintegraciones radiactivas peculiares, en las que aparecen nucleidos con excitación superior a la energía de ligadura del neutrón. En éstos, la manera más rápida de búsqueda de la estabilidad es la emisión de dicho neutrón, que aparece con el retardo que acumula su cadena de desintegración. El conjunto de estos neutrones se conocen con el nombre de neutrones diferidos y juegan un papel esencial en el control de la población neutrónica y del reactor.

Una cadena en la que aparece un neutrón diferido se inicia por ejemplo con el bromo-87, cuyo periodo de semidesintegración es de 54.5 segundos. Este bromo-87 cuando se obtiene directamente como producto de fisión inicia una cadena en la que él es emisor β^- obteniéndose Kr-87. Ocurre que el Kr-87 tiene 51 neutrones, justamente uno más que el número mágico 50, por lo cual le corresponde al último neutrón una energía de ligadura

de 5.1 MeV, muy inferior a los 8 MeV que en término medio corresponderían a los nucleones de dicho nucleido. Así pues, la aparición del Kr-87 en un estado virtual conlleva la aparición del neutrón, en competencia con los procesos de desexcitación por emisión. En este ejemplo, el Br-87 es lo que se denomina un núcleo precursor, puesto que es el que induce el retardo en la aparición del neutrón, dado que las desintegraciones anteriores tienen una vida muy corta respecto a la del bromo, y por otro lado el Kr-87 emite el neutrón inmediatamente tras su formación, en un plazo absolutamente nulo en comparación con el período del Br-87.

La procedencia de los neutrones diferidos corresponde a mecanismos como los indicados anteriormente, aunque los parámetros de las desintegraciones varían de un caso a otro. Aproximadamente existen unos 20 precursores relevantes para la formación de neutrones diferidos, aunque los de mayor importancia sean los que, o bien tienen un período de retardo en la aparición muy largo (precursores de muy largo período) o bien tienen una gran abundancia. Tradicionalmente se han agrupado los precursores en seis familias, que tienen como característica distintiva su período de semidesintegración o su constante de desintegración, íntimamente relacionadas. En la tabla 3.1 viene recogida la información más relevante de cada familia de diferidos, donde hay que destacar la importancia del parámetro β que representa la fracción de neutrones diferidos sobre el total: $\beta = \frac{\nu_d}{\nu}$.

En el campo de las fisiones térmicas se aprecia que el U-235 produce una abundancia de neutrones diferidos considerablemente superior a la del Pu-239. En efecto, la fracción total de neutrones diferidos para el Pu-239 es menos de la tercera parte que la del U-235, lo cual tiene consecuencias importantes en la cinética del reactor. Precisamente, a efectos de cinética el parámetro β es la magnitud más representativa y sirve para señalar un nivel de referencia máximo o de seguridad en la cantidad de reactividad positiva que se puede permitir en un reactor. Este parámetro se obtiene como la suma de todas las fracciones de diferidos, es decir:

$$\sum_{k=1}^{G_d} \beta_k = \beta$$

y el parámetro f_k que sale en las ecuaciones de balance de precursores es:

$$f_k = \frac{\beta_k}{\beta}$$

También hay que destacar que cuando se maneja, como es el caso, la ecuación de difusión con dependencia temporal otro parámetro cinético que hay que tener en cuenta y que hay que estudiar de manera explícita es el término $\frac{1}{v_g}$ siendo v_g la velocidad media de los neutrones en el grupo g .

Para concluir esta sección a continuación se adjunta un ejemplo del formato de librería para el código COBAYA3, donde se refleja la estructura y la manera de dar los datos ya explicados.

U-235			
Grupo	Período (s)	Constante de desintegración (s^{-1})	Fracción β_i
1	55.72	0.0124	0.000215
2	22.72	0.0305	0.001424
3	6.22	0.111	0.001274
4	2.30	0.301	0.002568
5	0.61	1.14	0.000748
6	0.23	3.01	0.000273
Fracción (β): 0.065			

Pu-239			
Grupo	Período (s)	Constante de desintegración (s^{-1})	Fracción β_i
1	54.28	0.0128	0.000073
2	23.04	0.0301	0.000626
3	5.6	0.124	0.000443
4	2.13	0.325	0.000685
5	0.618	1.12	0.000181
6	0.257	2.69	0.000092
Fracción (β): 0.0021			

Tabla 3.1: Neutrones diferidos provenientes de fisiones térmicas, en U-235 y Pu-239

SAMPLE 2G XS FORMAT

* Mod Dens Boron ppm Fuel Temp Mod Temp

3 3 3 0

D1 D2 D3

B1 B2 B3

F1 F2 F3

*

* -----

* BURNUP 0.15

* -----

*

* Transport XSEC Table

*

* GROUP 1

XS(D1,B1,F1) XS(D2,B1,F1) XS(D3,B1,F1)

XS(D1,B2,F1) XS(D2,B2,F1) XS(D3,B2,F1)

XS(D1,B3,F1) XS(D2,B3,F1) XS(D3,B3,F1)

XS(D1,B1,F2) XS(D2,B1,F2) XS(D3,B1,F2)

XS(D1,B2,F2) XS(D2,B2,F2) XS(D3,B2,F2)

XS(D1,B3,F2) XS(D2,B3,F2) XS(D3,B3,F2)

XS(D1,B1,F3) XS(D2,B1,F3) XS(D3,B1,F3)

XS(D1,B2,F3) XS(D2,B2,F3) XS(D3,B2,F3)

XS(D1,B3,F3) XS(D2,B3,F3) XS(D3,B3,F3)

* GROUP 2

...

*

* Absorption XSEC Table

...

*

* Nu-Fission XSEC Table

...

*

* Kappa-Fission XSEC Table

...

*

* Scattering XSEC Table

*

```

* GROUP 1 →1
* GROUP 1 →2
* GROUP 2 →1
* GROUP 2 →2
*
* ADF Table
...
*
* Fission Spectrum
*
* GROUP 1 2
CHI(G1) CHI(G2)
*
* Inverse Velocity
*
* GROUP 1 2
IVEL(G1) IVEL(G2)
*
* Delay Neutron Decay Constant (Lambda)
*
* GROUP 1 2 3 4 5 6
LAMBDA(G1) LAMBDA(G2) LAMBDA(G3) LAMBDA(G4) LAMBDA(G5) LAMBDA(G6)
*
* Delay Neutron Fraction (Beta)
*
* GROUP 1 2 3 4 5 6
BETA(G1) BETA(G2) BETA(G3) BETA(G4) BETA(G5) BETA(G6)
*
* Averaged fission yields for I-135, Xe-135, Pm-149, Sm-149
*
GAMMA(I-135) GAMMA(Xe-135) GAMMA(Pm-149) GAMMA(Sm-149)
*
* -----
* BURNUP 17.50
* -----

```


Capítulo 4

Generación de librerías de secciones eficaces con códigos de transporte deterministas

En el presente capítulo se van a especificar tanto las configuraciones geométricas del núcleo para el que se quieren obtener las secciones eficaces así como el rango de todas las posibles combinaciones de variables de operación. Estas especificaciones, en el encuadre de este proyecto, vienen determinadas por los documentos oficiales del proyecto NURISP, llamados deliverables. Asimismo se explican todas las actividades llevadas a cabo para generar los inputs de manera automática (código pre-proceso) y el tratamiento exigido por los outputs para poder extraer la información necesaria para el estudio de la dependencia de las secciones eficaces (código post-proceso).

4.1. Definición del espacio paramétrico para todas las condiciones de operación en núcleos PWR

Con objeto de generar las librerías de secciones eficaces requeridas para los subsiguientes cálculos de núcleo, es necesario definir una combinación limitada de las variables de estado influyentes. Para los análisis de núcleos PWR las variables de estado principales son la exposición, la densidad del moderador, la concentración de boro, la temperatura del combustible y la temperatura del moderador. Se asume que la presencia de una barra de control transforma un tipo de elemento combustible en otro tipo diferente, por lo que la inserción de barras de control no se toma como una variable de estado más.

Las siguientes consideraciones se deben tener en cuenta para determinar el importante rango de variación de las variables de estado, el cual debe cubrir todos los valores previstos tanto en las simulaciones de operación normal como en los análisis de los transitorios típicos:

- La concentración de boro varía desde 0 ppm hasta 2500 ppm.

Variable	Densidad	Conc.Boro	Temp. Moderador	Temp. Combustible
Unidades	g/cm^3	ppm	K	K
Valores de las variables	0.4	0	525	700
	0.49	500	550	800
	0.58	1000	580	900
	0.67	1500	600	1000
	0.76	2000	617	1100
	0.85	2500	—	—

Tabla 4.1: Rango de variación de las variables locales de operación o *data points*

- La temperatura más baja del moderador corresponde a las condiciones HZP (Hot Zero Power) y se asume que este valor es 525K. La temperatura más alta del moderador se asume que es 617K, que corresponde a la temperatura de saturación del agua a una presión de 155 bar, que es la presión nominal del reactor en operación para núcleos PWR.
- La densidad del moderador correspondiente a la temperatura del moderador más baja de 525K es de 0.85 g/cm^3 a la presión nominal. El valor mínimo considerado es de 0.4 g/cm^3 que se corresponde con una fracción de huecos del 40 %, para poder estudiar los transitorios.
- La temperatura del combustible varía desde 700K a 1100K.

En la tabla 4.1 se resume el rango de variación local de las variables.

Respecto al quemado, se van a realizar los cálculos siempre para combustible fresco, es decir con un quemado de 0 MWd/tU aunque es habitual definir unos pasos de quemado y hacer los mismos cálculos para todos los pasos definidos.

En cuanto a la estructura en grupos energéticos el colapsamiento se va a hacer en tres casos diferentes: en una estructura de dos grupos, de cuatro y de ocho. La relación entre grupos y el corte inferior de cada uno viene reflejado en la tabla 4.2.

Estructura en 2 grupos	Estructura en 4 grupos	Estructura en 8 grupos	Corte inferior de energía (eV)
1	1	1	2.2313E+06
		2	8.2085E+05
		3	9.1188E+03
	2	4	1.3007E+02
		5	3.9279E+00
	3	6	6.2506E-01
2	4	7	1.4572E-01
		8	0.0000E+00

Tabla 4.2: Grupos de Energia

4.2. Configuraciones geométricas

Al igual que en el caso anterior, para definir las configuraciones geométricas tanto de cada barra de combustible como su disposición en el elemento combustible; recurrimos a los deliverables del proyecto NURISP donde se detallan todas las especificaciones. En primer lugar hay que destacar que en este proyecto se va a trabajar siempre a nivel de elemento combustible. La parametrización de las secciones eficaces puede hacerse a nivel de celda o a nivel de elemento, según se desee. La diferencia se plasma en la geometría que se introduce en NEWT, que como se puede podrá comprobar en el input de NEWT que se adjunta un poco más adelante, en este proyecto siempre ha sido para elementos combustibles.

Siguiendo los deliverables del proyecto NURISP, los elementos combustibles con los que se van a trabajar están conformados por dos tipos diferentes de celdas. En primer lugar se tiene la celda clásica de combustible formada por una pastilla de combustible más el huelgo entre pastilla y vaina, y la vaina de zircalloy. Además de la fuel-pin también existe otro tipo de celda denominada IFBA de acuerdo al acrónimo en inglés de Integral Fuel Burnable Absorber.

Las celdas IFBA se usan para el control de reactividad de los elementos combustibles. El IFBA es un recubrimiento de diboruro de circonio (ZrB_2) en la pastilla de combustible que permite un control sobre la reactividad en un periodo relativamente corto de quemado. Las celdas tipo IFBA se localizan en las inmediaciones de los tubos guía y en las esquinas de los elementos, es decir en las zonas donde hay mayor gradiente de flujo, y

Tipo de celda	Fuel pin	IFBA pin	Tubo Guía
r1	0.3951	0.3951	0.5624
r2	0.4010	0.3991	0.6032
r3	0.4583	0.4010	
r4		0.4583	

Tabla 4.3: Dimensiones de las pin-cell (cm)

Tipo de celda	Fuel pin	IFBA pin	Tubo Guía
r0-r1	Combustible	Combustible	Agua
r1-r2	Huelgo	IFBA	Vaina
r2-r3	Vaina	Huelgo	
r3-r4		Vaina	

Tabla 4.4: Regiones de materiales en las pin-cell

precisamente se ubican ahí para tratar de aplanarlo al inicio del ciclo.

Las dimensiones y regiones de cada tipo de celda, incluyendo además los tubos guía se recogen en las tablas 4.3 y 4.4 y en la figura 4.1.

Respecto a la geometría del elemento combustible, éste tiene una geometría cuadrada con una disposición de 17 por 17 de celdas de combustible, tubos guía y celdas IFBA. El paso entre centro y centro de cada elemento es de 21.42 cm (que lógicamente coincide con el lado del cuadrado). De las 289 celdas 25 se corresponden con tubos guía e instrumentación, por lo que restan 264 barras de combustible por elemento. De éstas, 160 son celdas de combustible UO_2 con un enriquecimiento al 4.2% en peso en U-235; y 104 son celdas tipo IFBA localizadas como ya se ha dicho en las esquinas y en las inmediaciones de los tubos guía. La composición isotópica se corresponde con combustible fresco. Por último, la disposición del elemento combustible es como muestra la figura 4.2. [9]

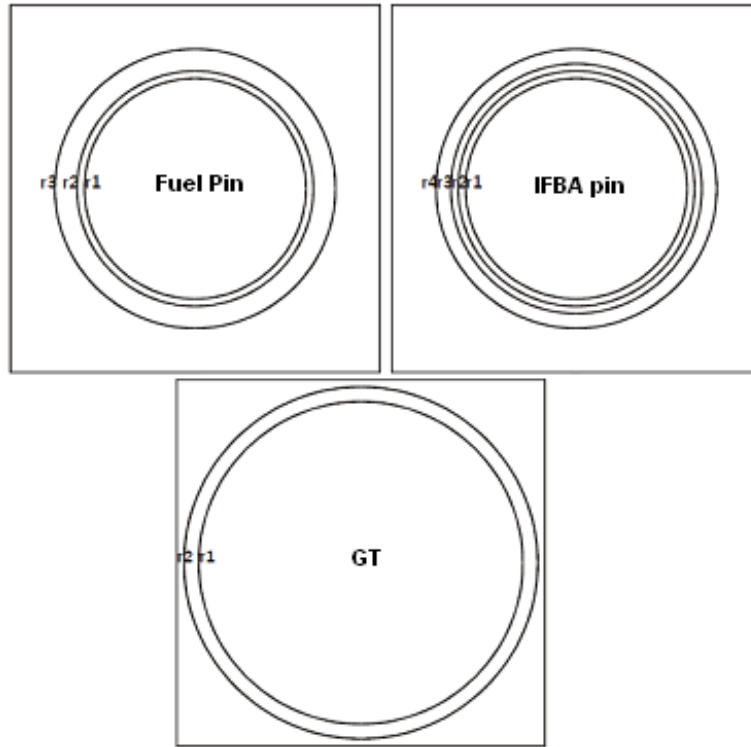


Figura 4.1: Geometrías de las pin-cell

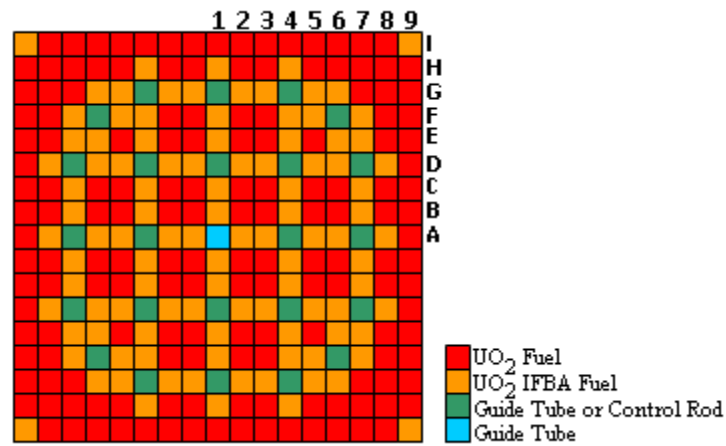


Figura 4.2: Disposición de un elemento combustible

El código NEWT también tiene la capacidad de generar archivos gráficos sobre la geometría introducida. En la figura 4.3 se puede observar la misma disposición del cuarto de elemento combustible en el archivo .ps generado por NEWT. Para activar esta opción, como se verá en el siguiente apartado al explicar el input de NEWT, en el bloque de parámetros hay activar la opción de `drawit=yes`.

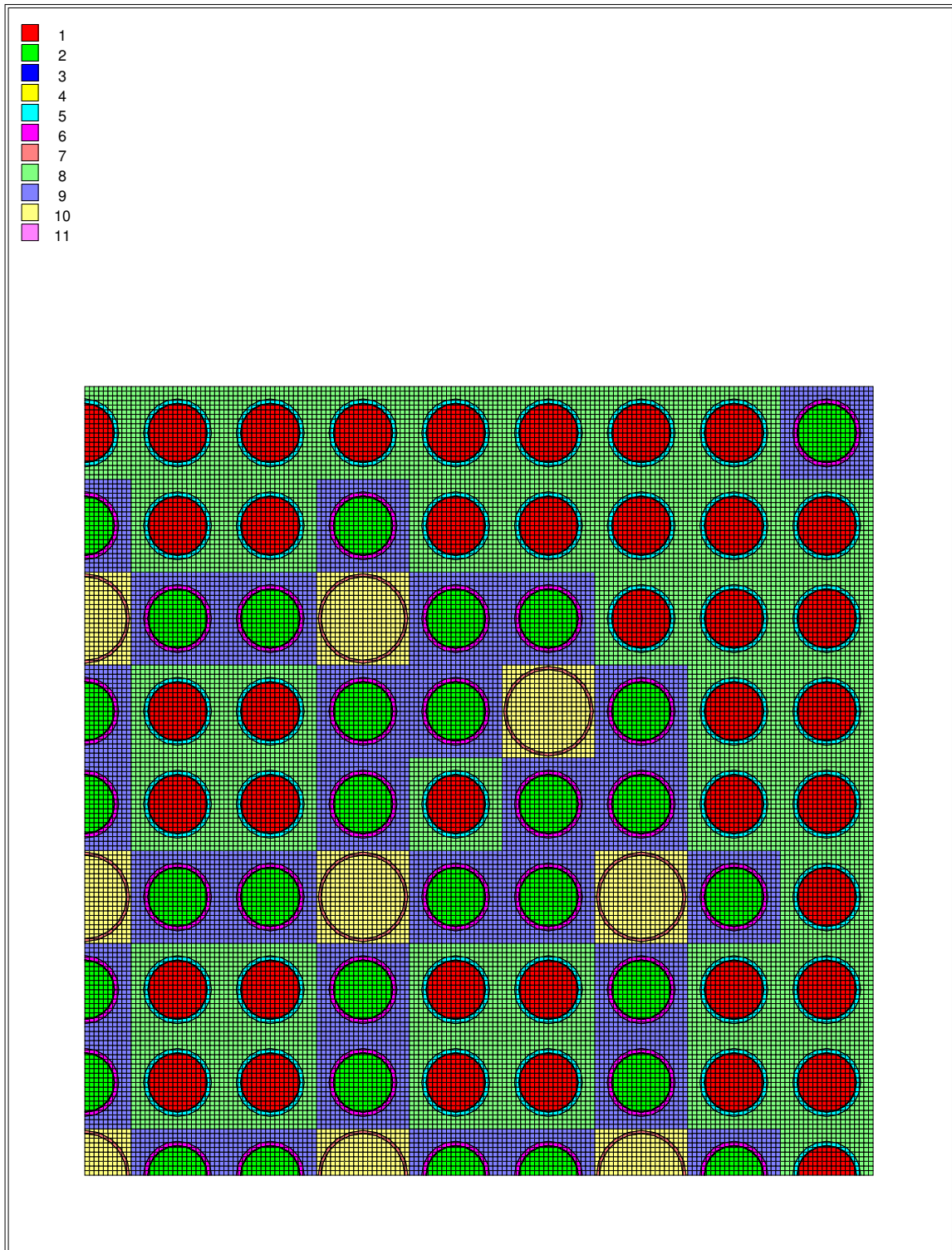


Figura 4.3: Disposición de $\frac{1}{4}$ elemento combustible en un archivo gráfico generado por NEWT

4.3. Generación de inputs: código pre-proceso

4.3.1. Estructura de un input de NEWT

Antes de comentar las rutinas y procedimientos seguidos para generar los inputs del código NEWT, conviene explicar previamente los diferentes bloques de los que se compone un input. Para ello seguiremos un input real a modo de guía, como el que sigue a continuación. [6]

```
=t-xsec parm=nitawl
UO2 sin control - fuel assembly
v5-44

read comp
'stand comp | mixture | temperature | end
' uo2 cell
u-235 1 DEN=10.24 0 9.71492E-04 813.15 end
u-238 1 DEN=10.24 0 2.18794E-02 813.15 end
o-16 1 DEN=10.24 0 4.57018E-02 813.15 end
' gap
o-16 2 DEN=0.001 0 3.76661E-05 578.15 end
' natural zirconium uo2 and water hole clad
zirconium 3 DEN=6.504 0 4.20495E-02 578.15 end
tin 3 DEN=6.504 0 6.42202E-04 578.15 end
iron 3 DEN=6.504 0 5.13463E-05 578.15 end
chromium 3 DEN=6.504 0 4.27932E-05 578.15 end
n-14 3 DEN=6.504 0 2.15407E-05 578.15 end
' borated h2o
h-1 4 DEN=0.75206 0 5.02932E-02 560 end
o-16 4 DEN=0.75206 0 2.51573E-02 560 end
b-10 4 DEN=0.75206 0 8.33778E-06 560 end
b-11 4 DEN=0.75206 0 3.35608E-05 560 end
end comp
read celldata
latticecell squarepitch
pitch=1.26 4
fuel=0.7902 1
gap=0.802 2
clad=0.9166 3 end
```

```
end celldata

end

=newt
PWR pin cell
read parameters
drawit=no
prtflux=no
prtmxsec=no
combine=no
cmfd=no
' xycmfd=0
epseigen=0.000001
epsinner=0.0000001
epsouter=0.000001
inners=5
outers=200
prtbalnc=yes
prtbroad=no
prthmmix=yes
hmoglib=50
sn=10
solntype=buck
timed=yes
run=yes
savrest=yes
end parameters

read materials
' mixture | pn order | "description" | end
1 2 end
2 2 end
3 2 end
4 3 end
end materials

read collapse
```



```
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
11 12 13 14 15 16 17 18 19 20
21 22 23 24 25 26 27 28 29 30
31 32 33 34 35 36 37 38 39 40
41 42 43 44
end collapse

read geom
'1/4 TUBO GUIA
unit 1
cylinder 11 0.5624 origin x=0.0 y=0.0 sides=20
cylinder 12 0.6032 origin x=0.0 y=0.0 sides=20
cuboid 13 0.63 0.0 0.63 0.0
'media ID-material bias-MC definicion-region
media 4 1 11
media 3 1 12 -11
media 4 1 13 -12
boundary 13 10 10

'1/2 HOR U02
unit 2
cylinder 21 0.3951 origin x=0.63 y=0.0 sides=20
cylinder 22 0.4010 origin x=0.63 y=0.0 sides=20
cylinder 23 0.4583 origin x=0.63 y=0.0 sides=20
cuboid 24 1.26 0.0 0.63 0.0
'media ID-material bias-MC definicion-region
media 1 1 21
media 2 1 22 -21
media 3 1 23 -22
media 4 1 24 -23
boundary 24 20 10

'1/2 HOR TUBO GUIA
unit 3
cylinder 33 0.5624 origin x=0.63 y=0.0 sides=20
cylinder 34 0.6032 origin x=0.63 y=0.0 sides=20
cuboid 35 1.26 0.0 0.63 0.0
'media ID-material bias-MC definicion-region
```

```
media 4 1 33
media 3 1 34 -33
media 4 1 35 -34
boundary 35 20 10

'U02
unit 4
cylinder 41 0.3951 origin x=0.63 y=0.63 sides=20
cylinder 42 0.4010 origin x=0.63 y=0.63 sides=20
cylinder 43 0.4583 origin x=0.63 y=0.63 sides=20
cuboid 44 1.26 0.0 1.26 0.0
'media ID-material bias-MC definicion-region
media 1 1 41
media 2 1 42 -41
media 3 1 43 -42
media 4 1 44 -43
boundary 44 20 20

'TUBO GUIA
unit 5
cylinder 53 0.5624 origin x=0.63 y=0.63 sides=20
cylinder 54 0.6032 origin x=0.63 y=0.63 sides=20
cuboid 55 1.26 0.0 1.26 0.0
'media ID-material bias-MC definicion-region
media 4 1 53
media 3 1 54 -53
media 4 1 55 -54
boundary 55 20 20

' 1/2 V U02
unit 6
cylinder 61 0.3951 origin x=0.0 y=0.63 sides=20
cylinder 62 0.4010 origin x=0.0 y=0.63 sides=20
cylinder 63 0.4583 origin x=0.0 y=0.63 sides=20
cuboid 64 0.63 0.0 1.26 0.0
'media ID-material bias-MC definicion-region
media 1 1 61
media 2 1 62 -61
```

```

media 3 1 63 -62
media 4 1 64 -63
boundary 64 10 20

' 1/2 V TUBO GUIA
unit 7
cylinder 73 0.5624 origin x=0.0 y=0.63 sides=20
cylinder 74 0.6032 origin x=0.0 y=0.63 sides=20
cuboid 75 0.63 0.0 1.26 0.0
'media ID-material bias-MC definicion-region
media 4 1 73
media 3 1 74 -73
media 4 1 75 -74
boundary 75 10 20

global unit 500
cuboid 80 10.71 0.0 10.71 0.0
array 1 80 place 1 1 0.0 0.0
media 0 1 80
boundary 80 17 17
end geom

read array
ara=1 nux=9 nuy=9 typ=square
fill
1 2 2 3 2 2 3 2 2
6 4 4 4 4 4 4 4 4
6 4 4 4 4 4 4 4 4
7 4 4 5 4 4 5 4 4
6 4 4 4 4 4 4 4 4
6 4 4 4 4 5 4 4 4
7 4 4 5 4 4 4 4 4
6 4 4 4 4 4 4 4 4
6 4 4 4 4 4 4 4 4
end fill
end array

read bounds

```

```
all=refl
end bounds

read homog
101 assembly-U02 1 2 3 4 end
end homog

read adf
1 101 n=10.71 s=0.0 e=10.71 w=0.0
end adf

read fluxplane
north 0.00 10.71 10.71 10.71
south 0.00 0.00 10.71 0.00
east 10.71 10.71 10.71 0.00
west 0.00 10.71 0.00 0.00
end fluxplane

end

' 2 GROUP CONDENSATION

=newt
read parameters
drawit=no
prtflux=yes
prtmxsec=no
combine=no
cmfd=no
' xycmfd=0
epseigen=0.000001
epsinner=0.0000001
epsouter=0.000001
inners=2
outers=100
prtbalnc=yes
prtbroad=no
prthmmix=yes
```

```
hmoglib=50
sn=10
solntype=buck
timed=yes
run=yes
restart=yes
savrest=yes
end parameters

read materials
' mixture | pn order | "description" | end
1 2 end
2 2 end
3 2 end
4 3 end
end materials

read collapse
25r1 19r2
end collapse

read homog
101 assembly-UO2 1 2 3 4 end
end homog

read adf
1 101 n=10.71 s=0.0 e=10.71 w=0.0
end adf

read fluxplane
north 0.00 10.71 10.71 10.71
south 0.00 0.00 10.71 0.00
east 10.71 10.71 10.71 0.00
west 0.00 10.71 0.00 0.00
end fluxplane

end
```

En primer lugar hay que destacar que cada bloque está introducido por el comando `read name` siendo `name` el nombre del bloque en cuestión, y finaliza con la expresión `end name`. El primer bloque que uno se encuentra es el correspondiente a la definición de la composición isotópica de los materiales. Se define para cada material los distintos isótopos que lo conforman, la densidad, la fracción en la mezcla de cada isótopo y la temperatura a la que se encuentra. Se tiene que hacer para todos los materiales, esto es, celda de combustible (si hay celdas de diferentes tipos por ejemplo IFBA y UO_2 normal se define el mismo número de veces como celdas diferentes haya) , veneno consumible si lo hay, vaina de zircalloy, huelgo, y agua. A continuación viene el módulo introducido por `read celldata` donde se definen los datos de las celdas de combustible introduciendo el paso de la misma y los radios de la pastilla, el huelgo y la vaina.

El código NEWT empieza realmente en este momento, cuando ya se han introducido previamente la composición isotópica y los datos de las celdas de combustible. El primer bloque existente dentro de lo que ya es el programa NEWT es el bloque correspondiente a los parámetros de control del problema, cuya palabra clave es `parameters`. En este módulo se especifican por ejemplo los criterios de convergencia, el refinamiento de la malla, el número de lazos iterativos, si se quiere obtener una imagen con la estructura definida, si se activa la aceleración del método de diferencias finitas, etc.

A continuación viene el paquete donde se definen las propiedades de los materiales y que tiene como palabra clave `materials`. Aquí se realiza únicamente la asignación del orden de dispersión P_n a cada material y se puede añadir alguna descripción si se desea.

Seguidamente se pasa a definir la estructura de los grupos de energía cuando se realiza un colapsamiento en un apartado iniciado por la palabra clave `collapse`. En nuestro caso NEWT hace los cálculos en 44 grupos de energía, ya que trabaja con una librería en este número de grupos (la información sobre la librería a la que recurre NEWT para hacer los cálculos puede verse en la tercera línea del programa: `v5-44`, donde el último número hace referencia al mencionado número de grupos), y cuando se quiere trabajar en menos grupos aquí se define la anchura de cada grupo de energía nuevo con respecto a los 44 con los que trabaja NEWT. Por ejemplo, en el caso de querer hacer un cálculo en 2 grupos se suele adoptar la distribución de colapsar los 25 primeros grupos en el grupo 1 y los 19 restantes en el 2. La inserción de este bloque no es obligatoria, pues sólo se pone cuando se quiere hacer un colapsamiento, al contrario que el caso anterior de las propiedades de los materiales que es sin embargo obligatoria su presencia.

En el siguiente bloque se explica la geometría del problema que se quiere resolver. Viene introducido por el comando `geom` y es el que más espacio ocupa habitualmente. Se define la estructura básica de la red mallada y se posicionan todos los cuerpos dentro de esta estructura. El bloque de geometría de NEWT consiste en unas especificaciones para una serie de bloques básicos de construcción conocidos como unidades o `units`. Una unidad se define como una colección de formas, una de las cuales constituye el contorno o frontera

de la unidad. Estas unidades son las celdas que integran el elemento combustible, y hay que definir tantas unidades como diferentes tipos de celdas haya. Además, si por simetría se trabaja con 1/4 de elemento hay que definir las medias celdas horizontales y verticales afectadas por el corte, ubicadas en el eje de simetría, así como el cuarto de celda ubicada en la celda central del elemento. La especificación completa de cada unidad consiste en un encabezamiento con la palabra reservada `unit` más un número identificativo y tres componentes distintos que son:

1. Cuerpos: son las formas geométricas, agujeros y posiciones relativas que definen los cuerpos dentro de la unidad.
2. Media: identifica qué material contiene (es decir, la composición) cada una de las formas geométricas.
3. Contorno (Boundary): donde se define la extensión de la unidad, que está asociada a la estructura de la malla general.

Igualmente hay que añadir una unidad más, denominada `global unit` que define el sistema global del problema, donde todas las unidades definidas anteriormente están integradas dentro de esta unidad global. En el caso típico de un 1/4 de elemento combustible 17 por 17, la unidad global es un cuadrado de lado el equivalente a 8 celdas y media, y cada celda es una unidad simple. Una vez que se tiene la unidad global el bloque referente a la geometría acaba con el comando `end geom`.

A continuación hay que detallar de alguna forma cómo están distribuidas las celdas en el elemento. En el bloque de geometría se han definido las celdas y el elemento pero no cómo se posicionan estas celdas dentro del elemento. Eso se hace en el siguiente bloque que se introduce por el comando `read array`. Aquí se van posicionando las celdas, que en el caso del presente proyecto ya se ha dicho que se hará de acuerdo a las especificaciones del proyecto NURISP. Esta operación es análoga a definir la dimensión de una matriz e ir rellenando progresivamente uno a uno sus términos.

Es necesario también precisar las condiciones de contorno de la unidad global, es decir en el perímetro del elemento combustible. Para ello está el bloque `bounds` donde por defecto NEWT aplica condición reflectiva. Aparte de esta condición se podrían poner condición de vacío, de albedo o simetría. Hay que especificar la condición en cada una de las cuatro caras, aunque si en todas es la misma bastaría con poner `all=refl` por ejemplo.

Como se vio anteriormente, NEWT puede ser usado para colapsar secciones eficaces a un formato reducido de grupos. Estas secciones eficaces generadas en esta operación son escritas como secciones eficaces microscópicas para cada nucleido en cada mezcla o material. Pero NEWT también ofrece la posibilidad de generar secciones eficaces macroscópicas homogeneizadas sobre uno o más materiales, lo cual se efectúa en el bloque introducido

por `read homog`. Las secciones eficaces homogeneizadas se generan empleando la estructura de colapsamiento energético definida en el bloque destinado a tal efecto o siguiendo la estructura de grupos de la librería que emplea (44) si no se indica nada en dicho bloque. La estructura de este bloque es, en primer lugar, un número identificador para las secciones eficaces, a continuación una cadena alfanumérica a modo de etiqueta descriptiva que haga referencia al nivel al que se está homogenizando (por ejemplo `fuel-cell` o `assembly- UO_2`) y finalmente la lista de materiales para ser homogeneizados terminando con la palabra `end`.

Seguidamente viene el módulo correspondiente a los factores de discontinuidad (ADF) que como sólo tiene sentido hablar de ellos cuando se tienen secciones eficaces homogeneizadas sólo se calcularán cuando también se haya llevado a cabo una homogenización, activada en el bloque anterior. El bloque empieza, como todos con el comando `read adf` y después el número identificativo de las secciones eficaces homogeneizadas introducido en el bloque anterior, más las coordenadas de los contornos norte, sur, este y oeste de la unidad global. Así se hace referencia al factor de discontinuidad en cada cara.

Por último viene un bloque opcional cuya palabra clave es `fluxplane` o `flux` que permite definir unos ejes x-y correspondientes a unos planos para los cuales el flujo medio se calcula y se imprime en el output. Esto se suele hacer cuando se quiere conocer por ejemplo el flujo en las fronteras del elemento. Introduciendo las coordenadas de los cuatro lados se puede conocer el flujo en cada cara.

Una vez introducido el input para un determinado problema, con una estructura en grupos de energía determinada se puede a continuación volver a introducir otro input con una estructura diferente sin necesidad de volver a definir toda la geometría del problema, que por lo general es lo más costoso de hacer.

4.3.2. Procedimiento de generación de los inputs

Para generar correctamente todos los inputs del código de transporte NEWT, es necesario, por un lado tener bien definida la geometría del problema, que en nuestro caso ya se ha comentado que obedece a los deliverables del proyecto NURISP; y por otro conocer la isotopía de los materiales tales como el combustible, acero de la vaina o el propio moderador, ya que, según se ha visto en el ejemplo del input, es necesario introducirlos en un bloque aparte.

Sobre este segundo aspecto, en la realización de este proyecto se han utilizado unas hojas de cálculo con las composiciones de todos los materiales procedentes de un bechmark elaborado por la NEA (Nuclear Energy Agency) y que se adjuntan en los anexos. En estas hojas de cálculo, para materiales que se van consumiendo o que van sufriendo una evolución isotópica como pueden ser el propio combustible o los materiales absorbentes (IFBA) se detallan las composiciones para diferentes pasos de quemado, aún cuando en este proyecto sólo se ha trabajado con combustible fresco de manera íntegra. Además, en

algunos casos, como es por ejemplo en el agua que actúa como refrigerante y moderador, esta composición isotópica depende de las condiciones de temperatura, densidad y concentración de boro disuelta en la misma.

Por tanto, para elaborar las isotopías de los materiales en función de las condiciones locales de operación, se recurre a un programa en FORTRAN llamado CREACOMPOS que las calcula. El programa CREACOMPOS lee unos archivos de texto con datos tabulados (sacados de las hojas de cálculo de la NEA) y guarda las composiciones e identificadores de cada uno de los isótopos en cada uno de los pasos de quemado definidos en la cabecera. Con ello genera las líneas del archivo de entrada que definen la composición de los materiales para el código NEWT de SCALE. Para los materiales cuya composición dependa de las condiciones locales calcula también dicha composición según los valores de densidad, temperatura de moderador y ppms de boro introducidos. Por ello, al llamar a este programa es necesario especificarle para qué paso de quemado (que insistimos una vez más, en nuestro caso será siempre 0) y para qué condiciones de temperatura de combustible, temperatura de moderador, concentración de boro disuelta y densidad del moderador se desean obtener las composiciones correspondientes, y el programa las calculará en consecuencia, y las exportará en el formato en el que se leen al ejecutar NEWT.

Ahora bien, el resto del input es siempre igual en todos los casos pues ni la geometría, ni los parámetros de convergencia, ni el número de colapsamientos que se va a realizar, etc. cambian con las condiciones. Para generar de manera automática los inputs de todos los casos que barran todo el espacio paramétrico definido por las variables de operación en la tabla 4.1 hay que ensamblar el archivo de salida del programa CREACOMPOS con la cabecera y el cuerpo del programa, de manera que conformen el input completo. Esto se hace de forma muy sencilla con rutinas del entorno LINUX con bucles recursivos que vayan cubriendo todo el espacio paramétrico.

En la figura 4.4 mostramos la rutina de LINUX que va llamando progresivamente al programa CREACOMPOS con las tablas de las composiciones de los materiales (archivos .csv), luego ensambla la cabecera del input, la salida del creacompos y el cuerpo del input (archivos p3.txt, salida.compo y p4.txt respectivamente) para renombrar el input de la manera codificada.

4.4. Tratamiento de los outputs: código post-proceso

Una vez que se tienen todos los inputs elaborados se mandan a ejecutar a NEWT, instrucción que es muy sencilla pues únicamente hay que poner en LINUX: NEWT seguido del input que se quiere ejecutar. Esta simplicidad facilita mucho la ejecución de todos los inputs, ya que con una rutina similar a la de la figura 4.4 se puede automatizar el proceso.

Una vez ejecutados se obtienen los correspondientes outputs, que son documentos de gran extensión. Estos outputs contienen una cantidad tremenda de información, ya que

```

for tcomb in 2
do
echo -n $tcomb
for tburn in 1
do
echo -n $tburn
for tfuel in 700 800 900 1000 1100
do
echo
echo -n $tfuel
for tmod in 525 550 580 600 617
do
echo
echo -n $tmod
for ppm in 0 500 1000 1500 2000 2500
do
echo
echo -n $ppm
for densidad in 400 490 580 670 760 850
do
echo
echo -n $densidad
echo 'Temperatura combustible: '$tfuel
creacompos-nodal uo2.csv clad.csv coolant.csv uo2IFBA.csv IFBA.csv $tburn $tfuel $tmod 2 $ppm $densidad
cat p3.txt salida.compo p4.txt > ${tcomb}-${tburn}-${tfuel}-${tmod}-${ppm}-${densidad}.input
done
done
done
done
done
done
done
done
done
done

```

Figura 4.4: Rutina para la generación automática de inputs

muestra los flujos, corrientes, etc. en todas las caras y en los 44 grupos con los que trabaja NEWT, y después los muestra en el número de grupos al que se ha querido colapsar. Con esto lo que se quiere decir es que no es posible trabajar directamente con los outputs obtenidos sino que requieren un tratamiento que permita extraer la información que realmente es necesaria y recopilarla en una tabla en el formato adecuado que reconozca el programa estadístico con el que se quiere trabajar.

Para ello, igual que en el caso de elaboración de los inputs, se recurre a un programa en FORTRAN llamado COMPCDFS que se encarga de leer los archivos de salida de NEWT y busca la salida de flujos y corrientes de interfaz, así como las secciones eficaces homogeneizadas para calcular los factores de discontinuidad de las interfaces. Los resultados los adjunta en unas tablas, que son muy fácilmente extraíbles para importar en el programa R.

Las variables que se adjuntan en la tabla para su estudio posterior y parametrización son: grupo, quemado, temperatura de combustible, temperatura de moderador, ppms de boro y densidad como variables, y sección eficaz de absorción, de transporte, coeficiente de difusión, sección eficaz de fisión, parámetro ν , producto $\nu \cdot \Sigma_{fiss}$, parámetro κ , producto $\kappa \cdot \Sigma_{fiss}$, coeficientes GET (ADF), inversa de la velocidad, secciones eficaces de dispersión entre grupos y el espectro de fisión como variables dependientes.

Igualmente el programa compcdfs también elabora una tabla con las constantes de semidesintegración y las fracciones de los 6 grupos de precursores de neutrones diferidos. En

Capítulo 4. Generación de librerías de secciones eficaces con códigos de transporte deterministas

TABLA PARA PARAMETRIZAR XS number of groups: 4										
grupo	burnup	tf	tm	ppm	dens	xs-abs	xs-tr	dif-coef	xs-fiss	
1	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.340060E-02	0.957724E-01	0.348047395E+01	0.290459E-02	
2	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.535078E-02	0.236207E+00	0.141119164E+01	0.112866E-02	
3	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.355498E-01	0.323969E+00	0.102890506E+01	0.991585E-02	
4	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.985204E-01	0.568734E+00	0.586097092E+00	0.593388E-01	
nu-fiss		nu		kappa-fission		kappa		GET-north	GET-south	invvel
0.787592E-02		0.271154277E+01		0.895465E-13		0.308293081E-10		0.101259968E+01	0.994015628E+00	0.515281E-09
0.277165E-02		0.245569968E+01		0.352759E-13		0.312546737E-10		0.100804854E+01	0.994560093E+00	0.989199E-08
0.241620E-01		0.243670487E+01		0.308241E-12		0.310856860E-10		0.997915109E+00	0.100522400E+01	0.316223E-06
0.144591E+00		0.243670246E+01		0.184459E-11		0.310857314E-10		0.102144288E+01	0.100438922E+01	0.216930E-05
xs-scat001		xs-scat002		xs-scat003		xs-scat004		spectrum		
0.118756000E+00		0.451451000E-01		0.290406000E-05		0.184497000E-07		0.731501000E+00		
0.000000000E+00		0.388391000E+00		0.214281000E-01		0.130960000E-03		0.268499000E+00		
0.000000000E+00		0.000000000E+00		0.455684000E+00		0.587339000E-01		0.441027000E-06		
0.000000000E+00		0.000000000E+00		0.200324000E-02		0.730872000E+00		0.218031000E-09		

Figura 4.5: Tabla de salida del programa COMPCDFS con los datos de secciones eficaces

TABLA PARA PARAMETRIZAR CINETICA							
grupo	burnup	tf	tm	ppm	dens	betta	lambda
1	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.225480E-03	0.125388E-01
2	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.151162E-02	0.309154E-01
3	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.140553E-02	0.114368E+00
4	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.296217E-02	0.308283E+00
5	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.103715E-02	0.122329E+01
6	0.00	800.00	580.00	1000.00	400.00	0.338019E-03	0.329573E+01

Figura 4.6: Tabla de salida del programa COMPCDFS con los datos cinéticos

las figuras 4.5 y 4.6 se muestran un ejemplo de las dos tablas elaboradas en el programa compcdfs.

Cuando se tienen las tablas por separado para todas las combinaciones y todos los grupos de energía, hay que recopilarlas todas y almacenarlas en una única según el número de grupos con el que se trabaja. Esto es, hay que crear una única tabla para el caso de dos grupos, otra para el de cuatro y una última para el de ocho grupos. Y estas tablas ya son con las que finalmente se puede trabajar en el programa R. En la figura 4.7 se muestra la rutina que va leyendo todas las tablas individuales para cada combinación de variables y las va recopilando en una única; y en la 4.8 un extracto de una tabla completa para el caso de dos grupos.

La secuencia completa de actividades y procesos que han intervenido en la realización del presente proyecto fin de carrera se recogen en el diagrama de flujo de la figura 4.9, que ilustra de manera global el conjunto de todas las actividades explicadas por separado. En dicha figura se recogen todos los programas utilizados para desarrollar las tareas pertinentes, ubicados dentro de cajas como si fueran funciones de transferencia.

En dicha figura 4.9 aparecen los programas en FORTRAN ya mencionados CREA-COMPOS y COMPCDFS, así como el código de transporte NEWT, el de difusión CO-

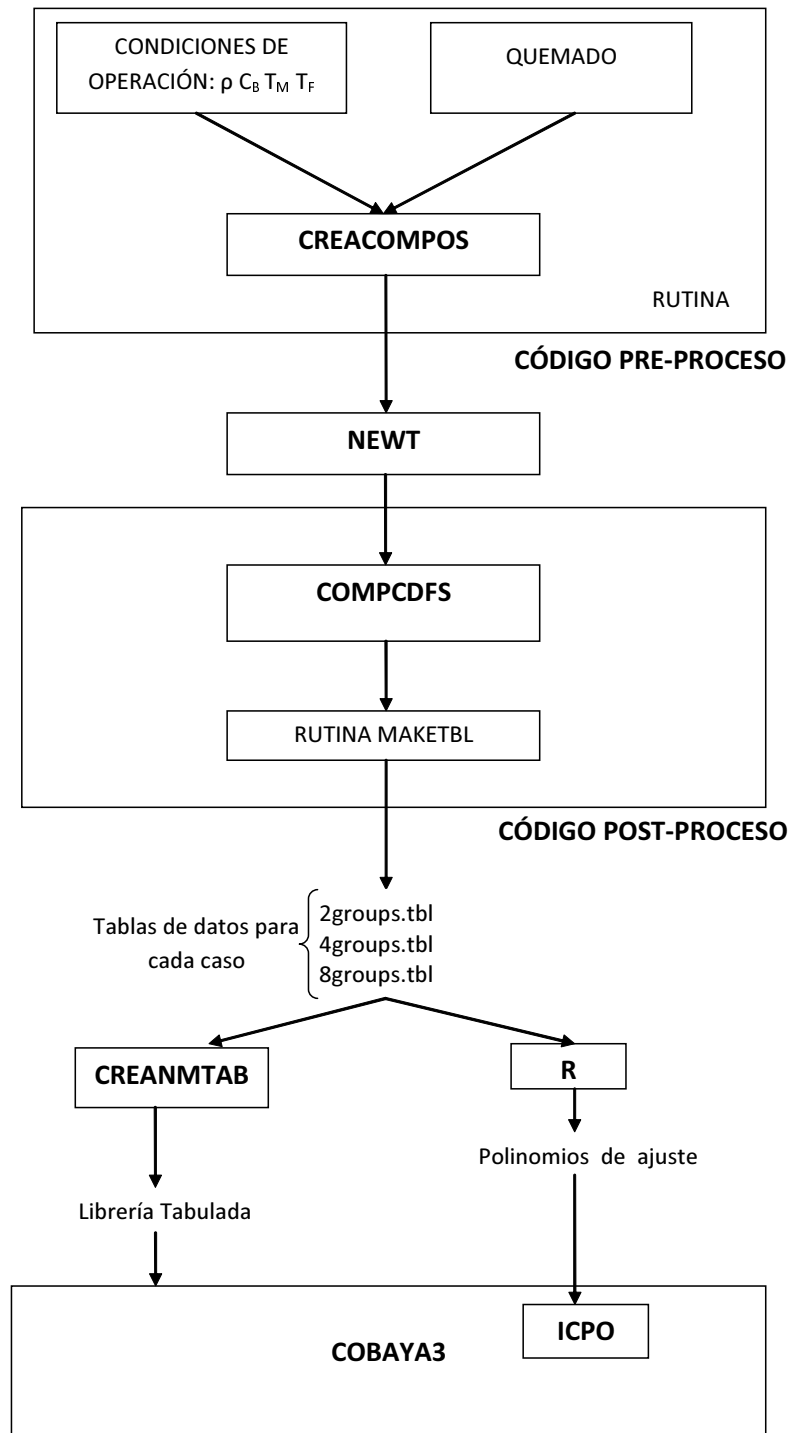


Figura 4.9: Diagrama de flujo global del proceso

BAYA3 y el programa estadístico R donde se realizan los ajustes. Además también dos programas, también en FORTRAN, no mencionados que son el CREANMTAB y el ICPO. El primero de ellos sirve para, a partir de las tablas de los datos en cada caso según el número de grupos, análogas a la de la figura 4.8, crear una librería tabulada siguiendo el mismo formato que la adjuntada en el capítulo 3. Este formato específico se denomina NEMTAB de ahí el nombre del programa. El programa ICPO se usa para desarrollar la librería parametrizada: en él se almacenan las diferentes dependencias con las variables de operación y los coeficientes correspondientes y así el COBAYA se vale de esta herramienta para poder reproducir los valores de los parámetros en los cálculos de difusión. Se trata de una rutina interna del propio código para poder recalculer los valores de secciones eficaces en cálculos iterativos.

Capítulo 5

Análisis de las variaciones al cambiar las variables locales

En el presente capítulo se muestran los resultados obtenidos al estudiar en el programa estadístico R la dependencia de los parámetros con las variables locales de operación. Se estudia para diferentes casos: variando únicamente una de las variables, variando dos y finalmente todas. En estos ajustes múltiples hay que analizar la posible existencia de efectos cruzados entre dos variables y añadir el término pertinente si corresponde. Para cada caso se propone un polinomio de ajuste, realizando este ajuste con técnicas de mínimos cuadrados. Como se verá hay algunos casos en los que no es posible realizar este ajuste debido a la poca influencia de alguna de las variables, lo que provocaría un coeficiente de regresión bajo que indicaría una mala bondad de ajuste.

5.1. Variables locales

Los cambios en las condiciones de operación modifican de manera casi inmediata las variables neutrónicas y termohidráulicas del reactor, provocando una variación en las secciones eficaces. Una variación de las secciones eficaces implica una variación del flujo neutrónico, pues aquéllas son los coeficientes de la ecuación de balance neutrónico. Por tanto, las variables que afectan a las secciones eficaces son variables de realimentación, ya que ante cambios de alguna de ellas, el sistema tiende a evolucionar en busca de una nueva solución de flujo.

Las variables de realimentación pueden ser de dos tipos:

- variables locales instantáneas, que son las tratadas en este proyecto, y cuyo efecto es una realimentación neutrónico-termohidráulica en el reactor.
- variables espectrales, que recogen la dependencia de las secciones eficaces con el espectro de flujo neutrónico. Estas variables son las asociadas a los efectos de historia espectral (o historia de quemado) y los efectos de vecindad. Los efectos de

historia espectral se deben fundamentalmente a que la isotopía de un nodo en el núcleo real depende considerablemente del espectro neutrónico al que ha sido sometido; y esa isotopía diferirá de la implícita en el cálculo de elemento quemado en condiciones de referencia que se utiliza para determinar las secciones eficaces homogeneizadas. Los isótopos que más afectan a las secciones eficaces son los isótopos fisibles y fértiles por un lado y los productos de fisión, destacando de entre éstos el Xe-135 y el Sm-149 por su elevada sección eficaz de absorción de neutrones térmicos.

En este proyecto sólo se va a tratar con las variables de realimentación locales que son las siguientes:

- **Temperatura del combustible:** La temperatura local depende de la tasa de generación de potencia local y la naturaleza del proceso de transferencia de calor al refrigerante, el cual va aumentando su temperatura a medida que atraviesa el núcleo. Típicamente un aumento de la temperatura del combustible aumenta las secciones eficaces de absorción del U-238 y el Pu-240, debido al ensanchamiento de las resonancias por efecto Doppler.
- **Temperatura del moderador:** Es una medida de la moderación de los neutrones térmicos. Al cambiar la temperatura se modificará el espectro de energía térmica, con un desplazamiento a energías mayores conforme la temperatura aumenta. Esta modificación tiende a hacer disminuir las secciones eficaces de absorción y fisión, y esta disminución de la tasa de fisiones compensa el efecto porque entonces nacen menos neutrones rápidos y el espectro no se endurece.

La separación entre la temperatura del moderador y la del combustible es lógica ya que pueden variar independientemente al no estar combustible y moderador íntimamente mezclados. Este es el caso de un reactor heterogéneo donde la transferencia de calor del combustible al moderador puede ser muy pobre en algunos casos. Un aumento brusco del nivel neutrónico aumentará la tasa de fisión y, por tanto, la temperatura del combustible aumentará antes de que el calor tenga oportunidad de transferirse al moderador.

- **Densidad del moderador:** El principal efecto de la densidad del moderador es disminuir la energía de los neutrones rápidos nacidos por fisión hasta la energía térmica. Por tanto una disminución de la densidad induce un fuerte cambio del espectro, provocando un endurecimiento del mismo.

La separación entre la temperatura del moderador y la densidad del agua se debe a que, desde el punto de vista neutrónico, sus efectos son independientes. Esto se ve claramente en aquellas zonas donde aparecen puntos calientes con generación de vapor. En ese caso no se produce un cambio de temperatura, sino una reducción drástica en la densidad del agua. La separación entre ambas variables permite llevar el análisis del cálculo neutrónico de las secciones eficaces fuera del rango propio de los PWR, hacia regímenes transitorios como el definido.

- **Concentración de boro:** El efecto de añadir ácido bórico H_3BO_3 consiste en un incremento de las capturas térmicas del moderador, disminuyendo los neutrones térmicos y por tanto produciendo un endurecimiento espectral. Este desplazamiento del espectro térmico da lugar a que disminuyan todas aquellas secciones eficaces que varían con el perfil $\frac{1}{v}$.

La variable de realimentación que caracteriza este efecto sobre las secciones eficaces es la concentración en partes por millón de ácido bórico en el refrigerante.[10]

5.2. Ajuste por mínimos cuadrados

Los ajustes que se van a realizar de las secciones eficaces expresadas como una función de las variables de operación, se van a hacer empleando el programa estadístico R de LINUX que los realiza empleando técnicas de mínimos cuadrados. Conviene, antes de entrar de lleno con el estudio de las dependencias, recordar brevemente el soporte teórico de esta técnica.

Mínimos cuadrados es una técnica de análisis numérico encuadrada dentro de la optimización matemática, en la que, dados un conjunto de pares se intenta encontrar la función que mejor se aproxime a los datos (“un mejor ajuste”) de acuerdo con el criterio de mínimo error cuadrático. En su forma más simple, intenta minimizar la suma de cuadrados de las diferencias ordenadas (llamadas residuos) entre los puntos generados por la función y los correspondientes en los datos.

Formulación formal del problema bidimensional

Supóngase el conjunto de puntos (x_k, y_k) siendo $k = 1, 2, \dots, n$. Sea $f_j(x)$, con $j = 1, 2, \dots, m$ una base de m funciones linealmente independientes. Queremos encontrar una función f combinación lineal de las funciones base tal que $f(x_k) \approx y_k$, esto es:

$$f(x) = \sum_{j=1}^m c_j f_j(x)$$

Se trata de hallar los m coeficientes c_j que hagan que la función aproximante $f(x)$ sea la mejor aproximación a los puntos (x_k, y_k) . El criterio de mejor aproximación puede variar, pero en general se basa en aquél que dé un menor error en la aproximación. El error en un punto (x_k, y_k) se podría definir como:

$$e_k = y_k - f(x_k)$$

En este caso se trata de medir y minimizar el error en el conjunto de la aproximación. En matemáticas existen diversas formas de definir el error, sobre todo cuando éste se aplica a un conjunto de puntos. Dicho error puede ser, por ejemplo, el error máximo, el error medio o el error cuadrático medio. Éste último se define como:

$$E_{cm}(f) = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^n (e_k)^2}{n}}$$

La aproximación mínimo cuadrada se basa en la minimización del error cuadrático medio, o, equivalentemente, en la minimización del radicando de dicho error, el llamado error cuadrático que simplemente es:

$$E_c(f) = \frac{\sum_{k=1}^n (e_k)^2}{n}$$

Para alcanzar este objetivo, suponemos que la función f es de una forma particular que contenga algunos parámetros que necesitamos determinar. Por ejemplo, supongamos que es cuadrática, lo que quiere decir que $f(x) = ax^2 + bx + c$, donde aún no conocemos los coeficientes a, b y c . El método consiste en buscar los valores de a, b y c tales que minimicen la suma de los cuadrados de los residuos, S :

$$S = \sum_{k=1}^n (y_k - f(x_k))^2$$

Esto explica el nombre de mínimos cuadrados. A las funciones que multiplican a los coeficientes buscados, esto es, a x^2, x y 1 , se les conoce con el nombre de funciones base de la aproximación. Dichas funciones base pueden ser cualesquiera funciones, y para ese caso se deduce a continuación la fórmula general en el caso de que la aproximación sea discreta y lineal. La aproximación de mínimos cuadrados es la mejor aproximación al conjunto de puntos (x_k, y_k) , según el criterio de mínimo error cuadrático. Es posible tomar otro tipo de aproximaciones si se toman los errores máximo o medio, pero la dificultad que entraña operar con ellos debido a que en sus definiciones intervienen valores absolutos hace que apenas se usen.

Solución del problema de mínimos cuadrados

La aproximación mínimo cuadrado tiene solución general para el caso de un problema de aproximación lineal en sus coeficientes c_j cualesquiera sean las funciones base $f_j(x)$ antes expuestas. Por lineal se entiende que $f(x)$ es una combinación lineal de dichas funciones base. Para hallar la expresión de la fórmula general una alternativa consiste en minimizar el error cuadrático antes expuesto, para lo cual hay que hacer uso del cálculo multivariable. La otra sería hacer una deducción geométrica con técnicas del álgebra lineal. A continuación vamos a emplear la primera alternativa para demostrar la solución del problema.

Deducción analítica de la aproximación discreta mínimo cuadrática lineal

Comenzamos definiendo de nuevo los datos de partida: sean n pares $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^n$ con abscisas distintas; y sean m funciones cualesquiera linealmente independientes $\{f_j(x)\}_{j=1}^m$, que se llamarán funciones base. Se desea encontrar una función $f(x)$ combinación lineal de dichas funciones base, tomando por ello la forma:

$$f(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x) + \dots + c_m f_m(x) = \sum_{j=1}^m c_j f_j(x)$$

Ello equivale a hallar los m coeficientes $\{c_j\}_{j=1}^m$. En concreto, se desea que tal función $f(x)$ sea la mejor aproximación a los n pares $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^n$ empleando el criterio de mínimo error cuadrático medio de la función $f(x)$ con respecto a los puntos $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^n$.

Ya vimos en la formulación del problema que minimizar el error cuadrático medio es equivalente a minimizar el error cuadrático, definido como el radicando del error cuadrático medio, que recordamos era:

$$E_c = \sum_{k=1}^n (y_k - \sum_{j=1}^m c_j f_j(x_k))^2$$

Así, los c_j que minimizan el error cuadrático medio también minimizan E_c y podrán ser calculados derivando e igualando a cero este último:

$$\frac{\partial E_c}{\partial c_i} = \sum_{k=1}^n 2(y_k - \sum_{j=1}^m c_j f_j(x_k))(-f_i(x_k)) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m$$

Se obtiene un sistema de m ecuaciones con m incógnitas que recibe el nombre de *Ecuaciones Normales de Gauss*. Operando con ellas se tiene:

$$\sum_{k=1}^n (\sum_{j=1}^m c_j f_j(x_k)) f_i(x_k) = \sum_{k=1}^n y_k f_i(x_k)$$

$$\sum_{j=1}^m (\sum_{k=1}^n f_i(x_k) f_j(x_k)) c_j = \sum_{k=1}^n y_k f_i(x_k)$$

Si se desarrolla el sumatorio y se visualiza la ecuación “ i ” del sistema de ecuaciones normales se tiene:

$$(\sum_{k=1}^n f_i(x_k) f_1(x_k)) c_1 + (\sum_{k=1}^n f_i(x_k) f_2(x_k)) c_2 + \dots + (\sum_{k=1}^n f_i(x_k) f_m(x_k)) c_m = \sum_{k=1}^n y_k f_i(x_k)$$

Podemos expresarlo en forma matricial teniendo:

$$\begin{bmatrix} (f_1, f_1)_d & (f_1, f_2)_d & \cdots & (f_1, f_m)_d \\ (f_2, f_1)_d & (f_2, f_2)_d & \cdots & (f_2, f_m)_d \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (f_m, f_1)_d & (f_m, f_2)_d & \cdots & (f_m, f_m)_d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (f_1, y)_d \\ (f_2, y)_d \\ \vdots \\ (f_m, y)_d \end{bmatrix}$$

Siendo $(a, b)_d$ el producto escalar discreto, definido para dos funciones dadas $h(x)$ y $g(x)$ como:

$$(h(x), g(x))_d = \sum_{k=1}^n h(x_k)g(x_k)$$

y para una función $h(x)$ y un vector cualquiera u , como:

$$(h(x), u)_d = \sum_{k=1}^n h(x_k)u_k$$

La resolución de dicho sistema permite obtener, para cualquier base de funciones derivable localmente, la mejor aproximación mínimo cuadrática $f(x)$ al conjunto de puntos antes mencionado. La solución es óptima puesto que se ha obtenido mediante un proceso de optimización del problema. [8]

5.3. Estudio de las secciones eficaces y factores de discontinuidad al variar una única variable

En este apartado ya se entra de lleno en el estudio y funcionalización de las secciones eficaces al variar únicamente una de las variables, manteniendo el resto de ellas constantes a unos valores fijados. Los valores son 900K para la temperatura del combustible, 580K para la temperatura del moderador, 1500 ppm para la concentración de boro y 670 g/cm^3 para la densidad del moderador. Cada caso viene caracterizado por la sección eficaz que corresponda de la que se tiene que estudiar su rango de variabilidad y el ajuste oportuno. Se entiende por rango de variabilidad, al cociente entre la diferencia entre el valor máximo y mínimo de la sección eficaz para esa variable, y su valor medio, expresado en tanto por cien. Es un parámetro muy adecuado porque da una idea de la importancia de la dependencia de la sección eficaz de turno con la variable en cuestión. Así, para rangos de variabilidad elevados la sección eficaz dependerá mucho de esa variable, y por el contrario si el rango de variabilidad es pequeño la dependencia será escasa.

Los ajustes simples tienen una gran utilidad, ya que a partir de ellos se puede intuir si determinados ajustes múltiples van a poder realizarse o no. Tal es el caso cuando una sección eficaz presenta un rango de variabilidad bajo con respecto a una variable, y posteriormente en ajustes múltiples en los que interviene esa variable no es posible llevarlo a cabo con una bondad deseable ya que para esa variable particular no se ajusta bien.

Se ha realizado una parametrización para las siguientes secciones eficaces: absorción, transporte, fisión y dispersión. Respecto a la sección eficaz de fisión hay que comentar previamente que en un inicio se realizaron los ajustes con los productos $\nu \cdot \Sigma_{fiss}$ y $\kappa \cdot \Sigma_{fiss}$ pero al comprobarse que tenían comportamientos completamente equivalentes y paralelos se optó por parametrizar únicamente la sección eficaz de fisión, y adoptar ν y κ como constantes para cada grupo de energía. Por tanto, una vez concluido el estudio de funcionalización de secciones eficaces y a la vista de la parametrización realizada en el programa estadístico R pueden extraerse las siguientes generalidades:

- La variable más influyente, esto es, que provoca mayores rangos de variabilidad en las secciones eficaces es la densidad del moderador. Esto ocurre para todas las secciones eficaces y en los dos grupos energéticos: rápido y térmico.
- La siguiente variable más influyente suele ser la concentración de boro, a excepción del caso de la sección eficaz de fisión en grupos térmicos en el que es la temperatura del moderador.
- Por el contrario, las variables menos influyentes son la temperatura del moderador y la del combustible. Sobre cuál influye menos se aprecia lo siguiente:
 - Para los grupos rápidos (1 de 2; 1, 2 y 3 de 4; 1, 2, 3, 4, 5 y 6 de 8) es más influyente la temperatura del combustible que la del moderador. La influencia de ésta última es bastante baja siendo habitual que sea del orden de 10^{-2} , 10^{-3} y 10^{-4} %. Incluso se da el caso de independencia total (variabilidad 0) para alguna sección eficaz en un grupo particular. Esta pequeña influencia de la temperatura del moderador provoca que en numerosas ocasiones no se pueda realizar un ajuste con suficiente validez.
 - En grupos térmicos (2 de 2; 4 de 4; 7 y 8 de 8) las secciones eficaces dependen más de la temperatura del moderador que de la del combustible. La variabilidad de la primera sigue siendo baja (0.836 % en el grupo 7 de 8, 2.42 % en el 8 de 8 y 3.7 % en el 4 de 4 y en el 2 de 2) mientras que la de la temperatura del combustible es del orden de 10^{-1} y 10^{-2} %; lo cual quiere decir que su efecto es más apreciable que el de la temperatura del moderador en los grupos rápidos.

En la figura 5.1 se representa la sección eficaz de absorción para el grupo rápido (de dos grupos) en función de la densidad. Se aprecia que para cada concentración de boro se tiene una gráfica diferente, y que estas gráficas están separadas entre sí, lo que indica la dependencia con las ppms de boro. Sin embargo en la figura 5.2 se

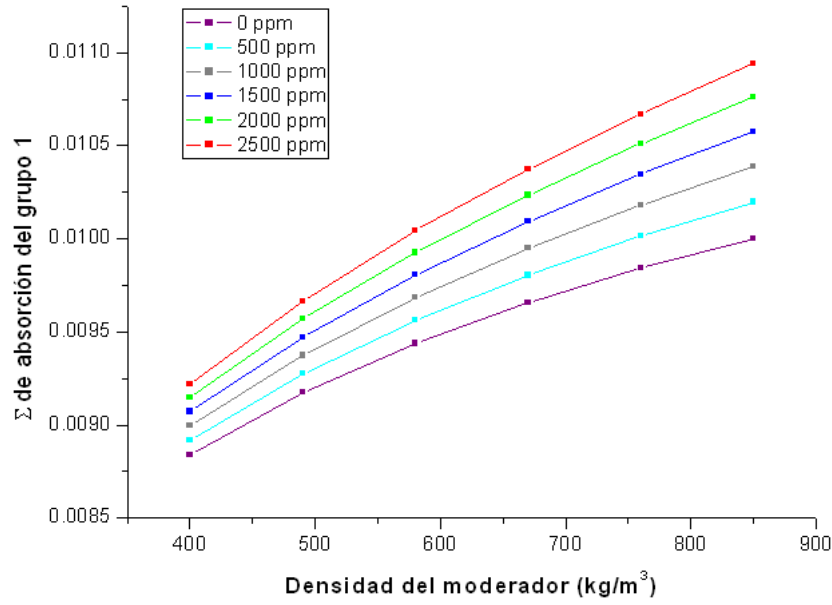


Figura 5.1: Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo rápido con diferentes concentraciones de boro.

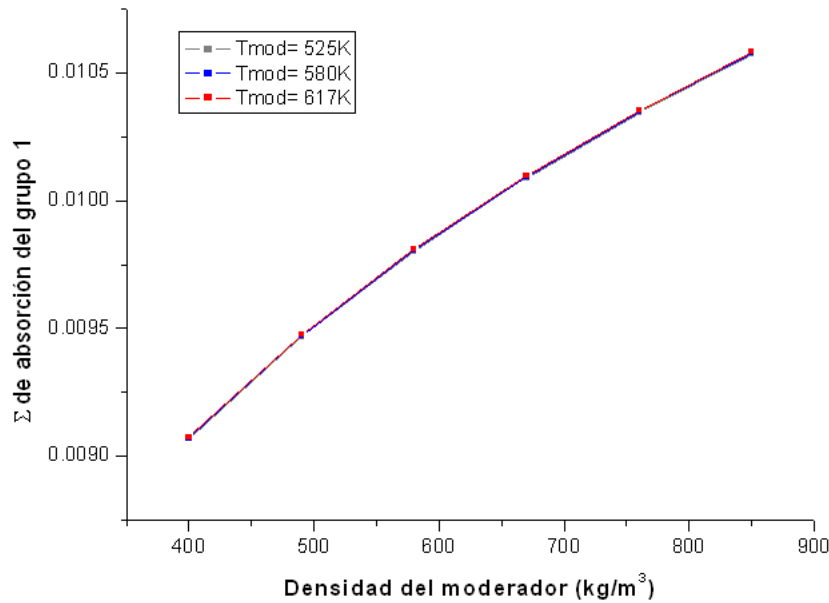


Figura 5.2: Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo rápido para diferentes temperaturas del moderador

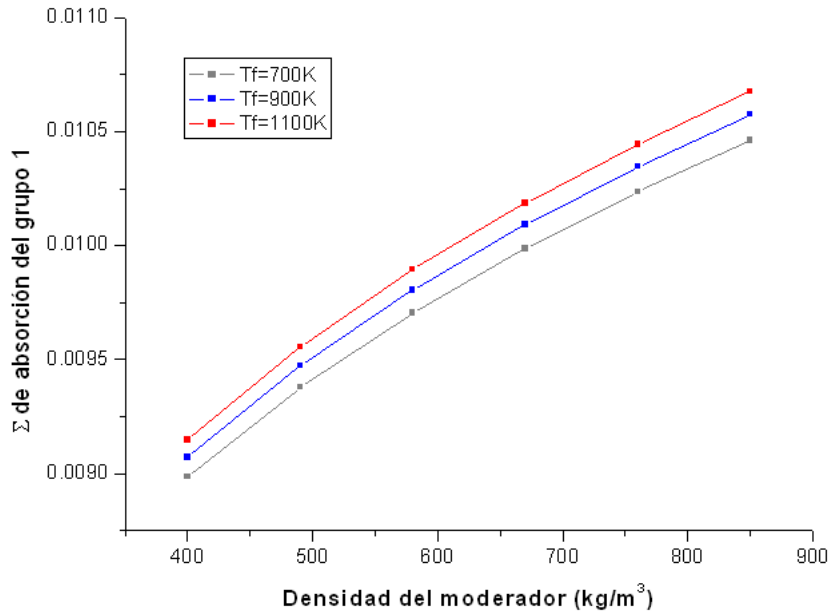


Figura 5.3: Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo rápido para diferentes temperaturas del combustible

representa la misma sección eficaz también frente a la densidad pero para diferentes temperaturas del moderador y se comprueba que las gráficas se solapan. Esto demuestra la inapreciable influencia de esta variable en la sección eficaz para el grupo rápido. Para ver la influencia de la temperatura del combustible se adjunta la gráfica 5.3 donde se vuelve a ver diferentes líneas separadas indicando su influencia relativa.

Las representaciones de la misma sección eficaz pero del grupo térmico se adjuntan en las gráficas 5.4, 5.5 y 5.6. En ellas se puede comprobar lo ya comentado en los puntos anteriores: como en los grupos térmicos la temperatura del moderador sí que es influyente y no lo es la del combustible. Ello se puede corroborar al ver que en la gráfica 5.5 las líneas para diferentes temperaturas del moderador están separadas mientras que en la 5.6 las líneas de las diferentes temperaturas de combustible se solapan como lo hacían en la 5.2 para cada temperatura del moderador.

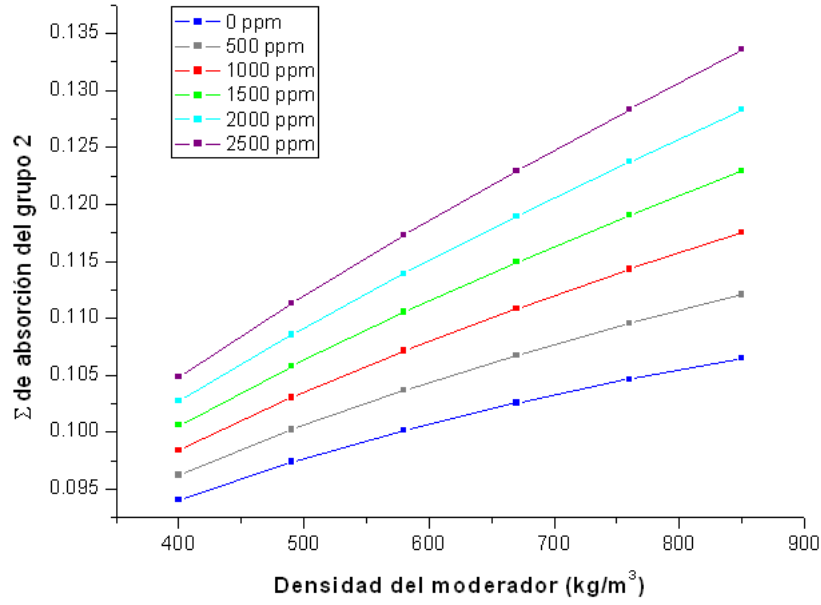


Figura 5.4: Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo térmico para diferentes concentraciones de boro

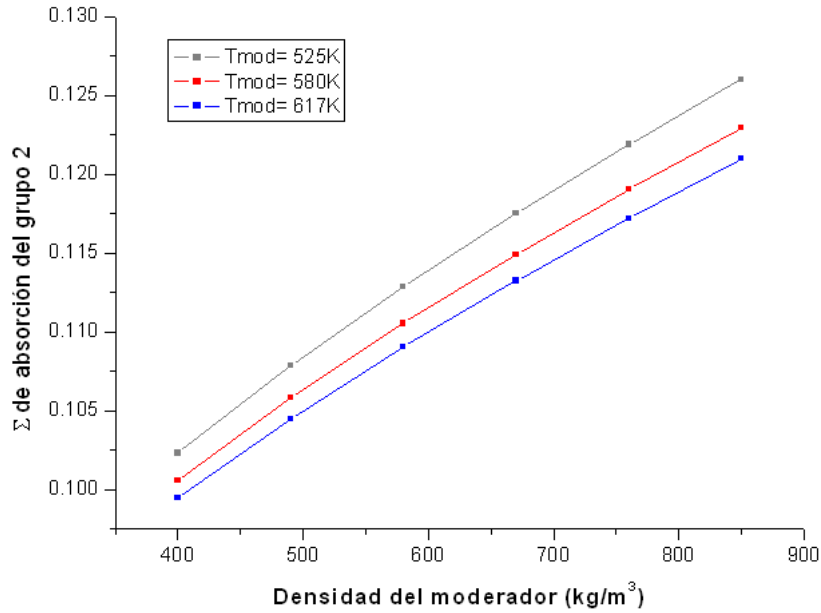


Figura 5.5: Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo térmico para diferentes temperaturas del moderador

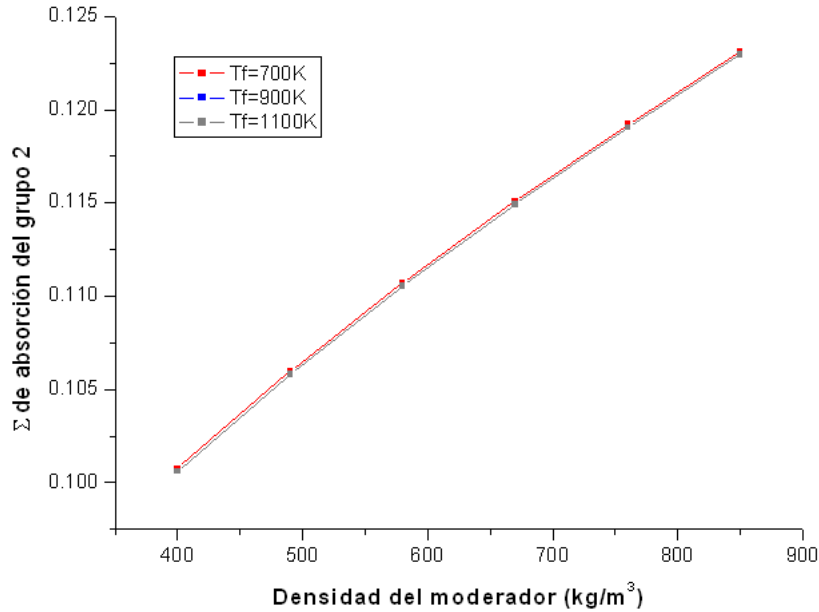


Figura 5.6: Representación de la sección eficaz de absorción frente a la densidad del moderador para el grupo térmico para diferentes temperaturas del combustible

- Se aprecia que los grupos térmicos son más sensibles pues ahí los porcentajes de variación con respecto a la densidad y a las ppm de boro son siempre mayores que en el caso de los rápidos.

Ejemplos:

Σ_{abs}

Grupo 1 de 2, Var(%) ρ : 15.23

Grupo 2 de 2, Var(%) ρ : 19.9

Grupo 1 de 2, Var(%)ppm: 7.12

Grupo 2 de 2, Var(%)ppm: 18.1

Grupo 1 de 4, Var(%)ppm: 0.46

Grupo 4 de 4, Var(%)ppm: 18.02

Grupo 1 de 8, Var(%) ρ : 8.94

Grupo 3 de 8, Var(%) ρ : 1.47

Grupo 7 de 8, Var(%) ρ : 13.9

Grupo 8 de 8, Var(%) ρ : 12.85

Σ_{trans}

Grupo 1 de 4, Var(%) ρ : 27.4

Grupo 2 de 4, Var(%) ρ : 35.96

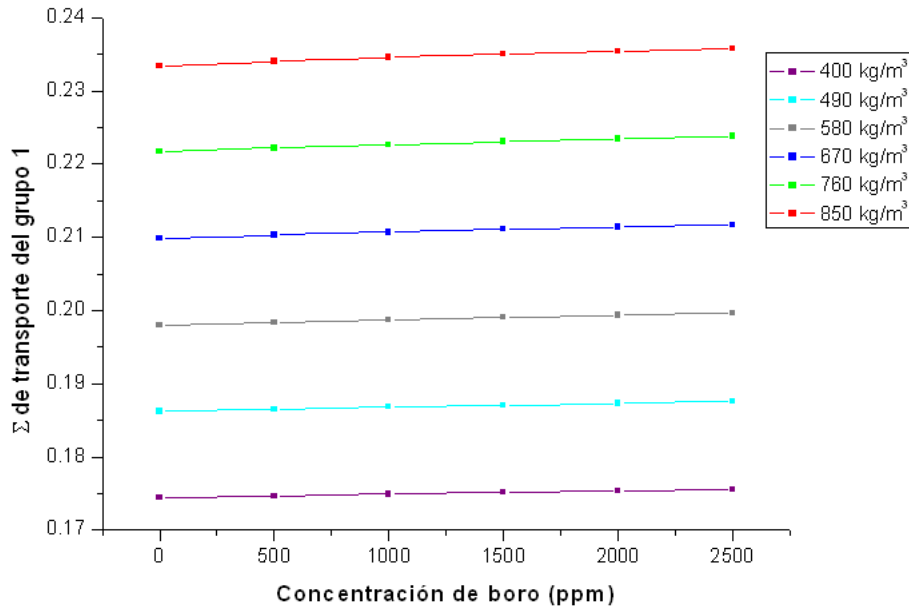


Figura 5.7: Representación de la sección eficaz de transporte frente a la concentración de boro para el grupo rápido para diferentes densidades del moderador

Grupo 3 de 4, $\text{Var}(\%) \rho$: 43.2

Grupo 4 de 4, $\text{Var}(\%) \rho$: 59.93

- La sección eficaz de transporte depende enormemente de la densidad del moderador, teniendo siempre elevados porcentajes de variabilidad, mientras que en el resto de variables las diferencias son notablemente inferiores.

Ejemplos

Grupo 1 de 8, $\% \rho$: 26.93 $\% \text{ppm}$: 0.033 $\% \text{T.comb}$: 0.0063

Grupo 3 de 8, $\% \rho$: 34 $\% \text{ppm}$: 0.27 $\% \text{T.comb}$: 0.02

Grupo 8 de 8, $\% \rho$: 57.65 $\% \text{ppm}$: 1.9 $\% \text{T.mod}$: 0.96

Grupo 1 de 2, $\% \rho$: 29.22 $\% \text{ppm}$: 0.88 $\% \text{T.comb}$: 0.017

Grupo 2 de 2, $\% \rho$: 59.93 $\% \text{ppm}$: 0.164 $\% \text{T.mod}$: 1.65

En la gráfica 5.7 se representa la sección eficaz de transporte para el grupo 1 de 2 en función de la concentración de boro en ppm para los diferentes valores de densidad, y se ve que las líneas son casi horizontales y están muy separadas entre sí indicando lo explicado en este punto.

- La sección eficaz de absorción en grupos térmicos depende notablemente de la densidad del moderador y de la concentración de boro, con rangos de variabilidad semejantes. Así por ejemplo se tiene:

Grupo 4 de 4, $\% \rho$: 19.9 $\% \text{ppm}$: 18 $\% \text{T.mod}$: 3.7

Grupo 7 de 8, $\% \rho$: 14 $\% \text{ppm}$: 18.1 $\% \text{T.mod}$: 0.836

Grupo 2 de 2, $\% \rho$: 19.9 $\% \text{ppm}$: 18.1 $\% \text{T.mod}$: 3.7

Sin embargo, en los grupos rápidos depende en mucha mayor medida de la densidad que de las ppm de boro siendo la diferencia más acusada que en el caso anterior. Por ejemplo:

Grupo 1 de 2, $\% \rho$: 15.23 $\% \text{ppm}$: 7.12

Grupo 1 de 4, $\% \rho$: 8.04 $\% \text{ppm}$: 0.46

Grupo 2 de 4, $\% \rho$: 8.28 $\% \text{ppm}$: 3.035

Grupo 1 de 8, $\% \rho$: 8.94 $\% \text{ppm}$: 0.29

Grupo 4 de 8, $\% \rho$: 8.05 $\% \text{ppm}$: 2.09

Este hecho también se puede observar en las gráficas 5.1 y 5.4, al estar en ésta última las diferentes familias de puntos más alejadas entre sí que en la primera. Esto indica su mayor influencia.

- La sección eficaz de fisión sigue la tendencia general de depender en primer lugar de la densidad del moderador, y luego de las ppm de boro o de la temperatura del moderador (según sea el grupo rápido o térmico respectivamente). Pero lo hace con la característica adicional de que los porcentajes de variabilidad son sensiblemente menores que para las demás secciones eficaces. Lo normal es que la dependencia sea aproximadamente del 3-4-6 % llegando como mucho a un 10 %.

Ejemplos:

Grupo 1 de 4

Σ_{fis} $\% \rho$: 4.57 $\% \text{ppm}$: 0.343 $\% \text{T.comb}$: 0.017

Σ_{abs} $\% \rho$: 8.04 $\% \text{ppm}$: 0.46 $\% \text{T.comb}$: 0.018

Σ_{trans} $\% \rho$: 27.4 $\% \text{ppm}$: 0.139 $\% \text{T.comb}$: 0.011

Grupo 4 de 4

Σ_{fis} $\% \rho$: 8.8 $\% \text{T.mod}$: 3.725 $\% \text{ppm}$: 2.98

Σ_{abs} $\% \rho$: 19.905 $\% \text{ppm}$: 18.02 $\% \text{T.mod}$: 3.7

Σ_{trans} $\% \rho$: 59.93 $\% \text{T.mod}$: 1.647 $\% \text{ppm}$: 0.164

Grupo 5 de 8

Σ_{fis} $\% \rho$: 1.81 $\% \text{T.comb}$: 0.9635 $\% \text{ppm}$: 0.016

Σ_{abs} $\% \rho$: 11.937 $\% \text{ppm}$: 3.305 $\% \text{T.comb}$: 2.705

Σ_{trans} $\% \rho$: 41.1 $\% \text{ppm}$: 0.4317 $\% \text{T.comb}$: 0.43

En la gráfica 5.8 se muestra dicho comportamiento.

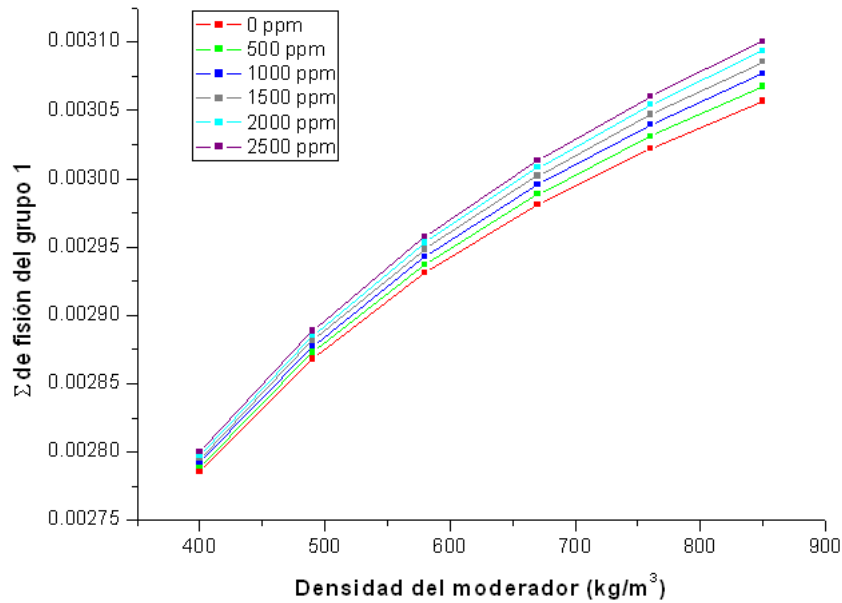


Figura 5.8: Representación de la sección eficaz de fisión en función de la densidad del moderador para el grupo rápido para diferentes valores de ppm

- La variable temperatura del combustible, tercera más significativa en el caso de los grupos rápidos, es más influyente en el parámetro sección eficaz de absorción que en el resto.

Ejemplos:

Grupo 3 de 8

Σ_{abs} %T.comb: 0.147

Σ_{trans} %T.comb: 0.02

Σ_{fis} %T.comb: 0.0059

Grupo 4 de 8

Σ_{abs} %T.comb: 4.22

Σ_{trans} %T.comb: 0.568

Σ_{fis} %T.comb: 0.1088

5.3.1. Secciones eficaces de dispersión

Debido a su comportamiento especial, diferente al de las secciones eficaces comentadas, y a que dentro del proceso de dispersión hay que matizar el grupo de energía emergente y el grupo nuevo lo que provoca un elevado número de secciones eficaces; éstas se estudian de forma separada. Conviene definir previamente la estructura de la matriz de secciones eficaces de dispersión para cada caso según el número de grupos que se estén estudiando.

El fenómeno del *up-scattering* no se da entre grupos rápidos ni entre grupos térmicos y rápidos separados, sin embargo si que lo hay entre grupos térmicos, ya que en ese caso los neutrones se encuentran en equilibrio térmico con el medio y en las colisiones pueden ganar o perder energía; y entre grupos térmicos y rápidos contiguos. Así por ejemplo sí que existen los términos $\Sigma_{s,2 \rightarrow 1}$, $\Sigma_{s,4 \rightarrow 3}$ y $\Sigma_{s,8 \rightarrow 7}$; y en cambio no existen los términos $\Sigma_{s,4 \rightarrow 2}$, $\Sigma_{s,4 \rightarrow 1}$ o $\Sigma_{s,8 \rightarrow 5}$. En consecuencia, la estructura de las matrices de dispersión para cada caso, y de acuerdo con la estructura de grupos de energía de la tabla 4.2, es como sigue a continuación:

- Para dos grupos:

$$\begin{pmatrix} \Sigma_{s,1 \rightarrow 1} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 2} \\ \Sigma_{s,2 \rightarrow 1} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 2} \end{pmatrix}$$

- Para cuatro grupos:

$$\begin{pmatrix} \Sigma_{s,1 \rightarrow 1} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 2} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 3} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 4} \\ 0 & \Sigma_{s,2 \rightarrow 2} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 3} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 4} \\ 0 & 0 & \Sigma_{s,3 \rightarrow 3} & \Sigma_{s,3 \rightarrow 4} \\ 0 & 0 & \Sigma_{s,4 \rightarrow 3} & \Sigma_{s,4 \rightarrow 4} \end{pmatrix}$$

- Para ocho grupos:

$$\begin{pmatrix} \Sigma_{s,1 \rightarrow 1} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 2} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 3} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 4} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 5} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 6} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 7} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 8} \\ 0 & \Sigma_{s,2 \rightarrow 2} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 3} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 4} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 5} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 6} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 7} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 8} \\ 0 & 0 & \Sigma_{s,3 \rightarrow 3} & \Sigma_{s,3 \rightarrow 4} & \Sigma_{s,3 \rightarrow 5} & \Sigma_{s,3 \rightarrow 6} & \Sigma_{s,3 \rightarrow 7} & \Sigma_{s,3 \rightarrow 8} \\ 0 & 0 & 0 & \Sigma_{s,4 \rightarrow 4} & \Sigma_{s,4 \rightarrow 5} & \Sigma_{s,4 \rightarrow 6} & \Sigma_{s,4 \rightarrow 7} & \Sigma_{s,4 \rightarrow 8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \Sigma_{s,5 \rightarrow 5} & \Sigma_{s,5 \rightarrow 6} & \Sigma_{s,5 \rightarrow 7} & \Sigma_{s,5 \rightarrow 8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Sigma_{s,6 \rightarrow 6} & \Sigma_{s,6 \rightarrow 7} & \Sigma_{s,6 \rightarrow 8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Sigma_{s,7 \rightarrow 6} & \Sigma_{s,7 \rightarrow 7} & \Sigma_{s,7 \rightarrow 8} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \Sigma_{s,8 \rightarrow 6} & \Sigma_{s,8 \rightarrow 7} & \Sigma_{s,8 \rightarrow 8} \end{pmatrix}$$

Respecto al comportamiento de las secciones eficaces de dispersión en función de las variables de operación caben extraerse las siguientes conclusiones:

- La variable más influyente, y con gran diferencia, es la densidad del moderador. Sus rangos de variabilidad en todos los casos son elevados llegando a alcanzar más del 75 % la diferencia entre el valor máximo y el valor mínimo. Este hecho es totalmente lógico y coherente ya que el proceso de dispersión viene siempre determinado por la densidad del moderador, resultando que cuanto más alta es la densidad más moderación se produce.

- El resto de variables (concentración de boro, temperatura del moderador y temperatura del combustible) tienen una influencia mínima sobre las secciones eficaces, y sus rangos de variabilidad son bajos ya que no llegan a alcanzar el 3 % en los grupos rápidos. De entre las tres, la que menos influencia tiene es la temperatura del moderador seguida de la del combustible y a continuación la concentración de boro.

Ejemplos:

En dos grupos

$\Sigma_{s,1 \rightarrow 1}$ % ρ : 48.727 %ppm: 0.8047 %T.comb: 0.0523 %T.mod: 0.01744

$\Sigma_{s,1 \rightarrow 2}$ % ρ : 87.037 %ppm: 1.731 %T.comb: 0.518 %T.mod: 0.3996

En cuatro grupos

$\Sigma_{s,1 \rightarrow 3}$ % ρ : 67.69 %ppm: 0.412 %T.comb: 0.02123 %T.mod: 0.00191

$\Sigma_{s,2 \rightarrow 4}$ % ρ : 77.007 %ppm: 2.0824 %T.comb: 0.2668 %T.mod: 0.0035

$\Sigma_{s,3 \rightarrow 3}$ % ρ : 55.77 %ppm: 0.1509 %T.comb: 0.07566 %T.mod: 0.0057

En ocho grupos

$\Sigma_{s,1 \rightarrow 5}$ % ρ : 69.617 %ppm: 0.08268 %T.comb: 0.00483 %T.mod: 0.0012

$\Sigma_{s,3 \rightarrow 4}$ % ρ : 69.49 %ppm: 0.9755 %T.comb: 0.0452 %T.mod: 0.00151

$\Sigma_{s,4 \rightarrow 7}$ % ρ : 75.05 %ppm: 0.496 %T.comb: 0.1733 %T.mod: 0.0029

$\Sigma_{s,5 \rightarrow 5}$ % ρ : 53.36 %T.comb: 0.18637 %ppm: 0.0443 %T.mod: 0.000166

- La excepción a este comportamiento general ocurre en las secciones eficaces de *up-scattering* donde la variable temperatura del moderador pasa a tener una importancia muy significativa, pudiendo llegar a ser la variable más influyente.

Ejemplos:

En dos grupos

$\Sigma_{s,2 \rightarrow 1}$ %T.mod: 23.656 %ppm: 14.196 %T.comb: 7.202 % ρ : 5.661

En cuatro grupos

$\Sigma_{s,4 \rightarrow 3}$ %T.mod: 23.656 %ppm: 14.196 %T.comb: 7.202 % ρ : 5.661

(Nótese que $\Sigma_{s,2 \rightarrow 1}$ y $\Sigma_{s,4 \rightarrow 3}$ tienen el mismo comportamiento al ser ambas iguales, ya que al no existir el término $\Sigma_{s,4 \rightarrow 2}$ los neutrones que pasan del grupo 2 al 1 en dos grupos son los mismos que pasan del 4 al 3 según la estructura de la tabla 4.2.)

En ocho grupos

$\Sigma_{s,7 \rightarrow 6}$ % ρ : 27.49 %T.mod: 15.812 %ppm: 6.975 %T.comb: 6.9525

$\Sigma_{s,8 \rightarrow 6}$ % ρ : 70.4135 %T.mod: 26.23 %ppm: 0.732 %T.comb: 0.0945

$\Sigma_{s,8 \rightarrow 7}$ % ρ : 64.386 %T.mod: 31.6 %T.comb: 1.485 %ppm: 1.1

- La dispersión entre grupos térmicos es más sensible a la temperatura del moderador que en el resto de casos. Esto hace que el porcentaje de variabilidad de esta variable dos o tres órdenes de magnitud mayor que el valor en los grupos rápidos.

Ejemplos:

En ocho grupos:

$$\Sigma_{s,7 \rightarrow 7} \quad \% \rho: 56.99 \quad \%T.mod: 0.75175 \quad \%ppm: 0.569 \quad \%T.comb: 0.1288$$

$$\Sigma_{s,7 \rightarrow 8} \quad \% \rho: 78.162 \quad \%ppm: 2.814 \quad \%T.mod: 0.2416 \quad \%T.comb: 0.1156$$

$$\Sigma_{s,8 \rightarrow 8} \quad \% \rho: 67.53 \quad \%T.mod: 3.135 \quad \%ppm: 0.717 \quad \%T.comb: 0.075$$

- En las dispersiones en las que el grupo emergente y el grupo al que llega el neutrón son el mismo, los porcentajes de variabilidad respecto a la densidad del moderador son sensiblemente menores que para las dispersiones en las que se cambia de grupo de energía.

Ejemplos:

En cuatro grupos

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 1} \quad Var(\%)\rho: 30.25$$

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 2} \quad Var(\%)\rho: 49.54$$

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 3} \quad Var(\%)\rho: 67.687$$

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 2} \quad Var(\%)\rho: 49.88$$

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 3} \quad Var(\%)\rho: 76.22$$

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 4} \quad Var(\%)\rho: 77$$

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 3} \quad Var(\%)\rho: 55.764$$

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 4} \quad Var(\%)\rho: 76.28$$

En ocho grupos

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 1} \quad Var(\%)\rho: 25.7$$

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 2} \quad Var(\%)\rho: 45.6$$

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 8} \quad Var(\%)\rho: 66.883$$

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 3} \quad Var(\%)\rho: 43.512$$

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 4} \quad Var(\%)\rho: 69.49$$

$$\Sigma_{s,4 \rightarrow 4} \quad Var(\%)\rho: 52.8$$

$$\Sigma_{s,4 \rightarrow 5} \quad Var(\%)\rho: 74.213$$

$$\Sigma_{s,6 \rightarrow 6} \quad Var(\%)\rho: 53.7$$

$$\Sigma_{s,6 \rightarrow 7} \quad Var(\%)\rho: 71.58$$

En las figuras 5.9 e 5.10 se muestran las secciones eficaces de dispersión del grupo 1 al 2 y del 2 al 1 respectivamente. En la primera se puede ver la gran dependencia y linealidad de la sección eficaz frente a la densidad del moderador y su casi invarianza frente a la concentración de boro. En la segunda, por el contrario, al ser una sección eficaz de *upp-scattering* se ve el comportamiento descrito y como depende sobre todo de la temperatura del moderador, mientras que para la densidad del mismo es menos dependiente.

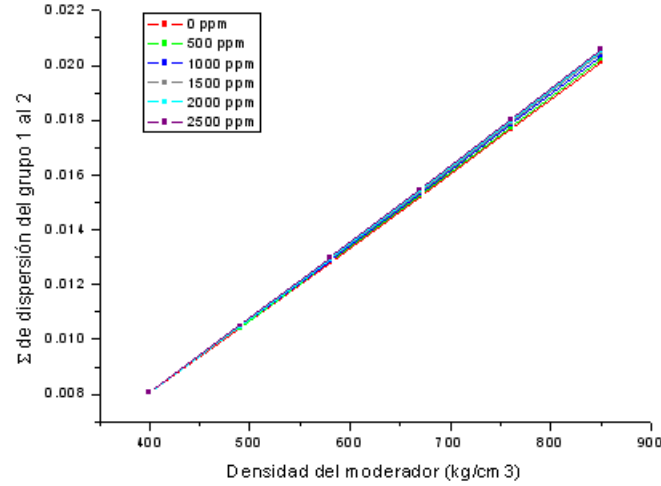


Figura 5.9: Representación de la sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 2 en función de la densidad del moderador para diferentes valores de concentración de boro

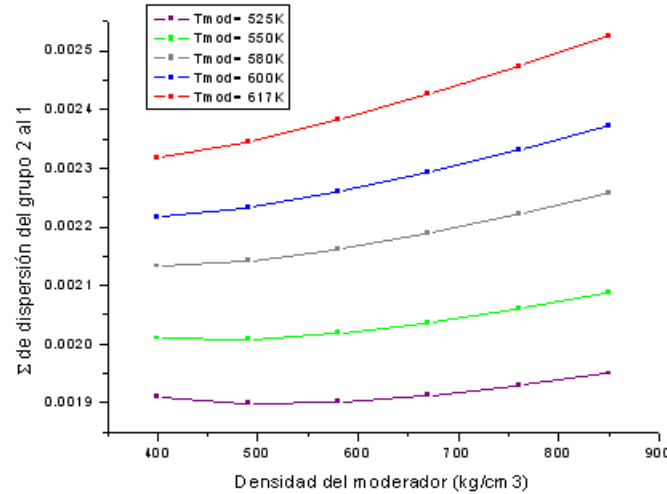


Figura 5.10: Representación de la sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 1 en función de la densidad del moderador para diferentes valores de temperatura del moderador

5.3.2. Factores de discontinuidad

Los factores de discontinuidad calculados por la teoría GET tienen la misma tendencia que las secciones eficaces de absorción, transporte y fisión. Sí hay que reseñar que se tienen dos factores de discontinuidad diferentes al realizarse los cálculos a nivel de $\frac{1}{4}$ de elemento combustible. Por un lado las caras Norte y Este ven el exterior, y por otro las caras Sur y Oeste lindan con otro cuarto de elemento combustible cada una, y tienen el mismo factor de discontinuidad. En cuanto a su dependencia con las condiciones de operación hay que mencionar las siguientes particularidades:

- La dependencia de los coeficientes GET con las variables de operación no es muy acusada. La variabilidad con respecto a la variable que más influye (que siempre es la densidad del moderador) en el caso más extremo llega al 2 %, siendo lo habitual que esté en torno al 0.5 - 1 %.

Ejemplos:

Grupo 1 de 2

GET-N.E. $\text{Var}(\%) \rho$: 0.94

GET-S.W. $\text{Var}(\%) \rho$: 0.9046

Grupo 2 de 2

GET-N.E. $\text{Var}(\%) \rho$: 1.12

GET-S.W. $\text{Var}(\%) \rho$: 0.237

Grupo 2 de 4

GET-N.E. $\text{Var}(\%) \rho$: 0.962

GET-S.W. $\text{Var}(\%) \rho$: 0.857

Grupo 4 de 8

GET-N.E. $\text{Var}(\%) \rho$: 1.477

GET-S.W. $\text{Var}(\%) \rho$: 0.86

Grupo 7 de 8

GET-N.E. $\text{Var}(\%) \rho$: 0.6072

GET-S.W. $\text{Var}(\%) \rho$: 0.1586

- El factor de discontinuidad GET-N.E. es más sensible a las variaciones de la densidad del moderador al tener por regla general mayores rangos de variabilidad.

Ejemplos:

Grupo 8 de 8

GET-N.E. $\text{Var}(\%) \rho$: 1.12

GET-S.W. $\text{Var}(\%) \rho$: 0.47

Grupo 5 de 8

GET-N.E. $\text{Var}(\%)_{\rho}$: 2.088

GET-S.W. $\text{Var}(\%)_{\rho}$: 1.0956

Grupo 2 de 4

GET-N.E. $\text{Var}(\%)_{\rho}$: 0.962

GET-S.W. $\text{Var}(\%)_{\rho}$: 0.857

5.4. Estudio de las secciones eficaces y factores de discontinuidad en los ajustes múltiples

En este apartado se van a comentar las características más importantes en la realización de los ajustes de los parámetros al variar más de una variable. En estos casos cobra vital importancia la posible aparición de los efectos cruzados, que son variaciones de una variable por el hecho de que otra variable diferente varía. Cuando esto sucede es necesario introducir en el polinomio de ajuste un término que sea el producto de dichas dos variables.

La metodología que se ha llevado a cabo para estudiar los ajustes con más de una variable para cada sección eficaz y factor de discontinuidad ha sido:

- En primer lugar se han estudiado todos los casos de variación de dos variables manteniendo las otras dos constantes. Esto se hace así para que en estos ajustes dobles vayan surgiendo los efectos cruzados entre las variables relacionadas entre sí. Esta actividad implica seis ajustes, aunque en numerosas ocasiones no se pueden llevar a cabo ajustes en los que interviene la temperatura del moderador cuando ésta tiene poca influencia, hecho que es observable en el ajuste individual.
- A continuación se realizan cuatro ajustes en los que se mantiene en cada uno de ellos una variable constante y se hace variar al resto. En estos ajustes se pretende verificar la existencia de los efectos cruzados que han salido en los ajustes dobles anteriores, así como incorporar si es necesario algún efecto cruzado triple o algún término de orden superior que no haya sido necesario en los ajustes anteriores.
- Finalmente se lleva a cabo el ajuste final haciendo variar todas las variables y del cual se obtiene el polinomio de ajuste propuesto para la sección eficaz que corresponda en función de las variables de operación. Este polinomio de ajuste propuesto debe incorporar los términos de efectos cruzados que hayan ido saliendo en el análisis progresivo hasta el momento así como los términos de órdenes superior. En el caso en el que alguna variable no tenga influencia (variabilidad nula en el ajuste individual) el polinomio de ajuste propuesto será el obtenido en el ajuste en el que intervengan las otras tres variables.

En los ajustes múltiples es más difícil sacar generalidades como se hizo en los ajustes simples. Esto es debido a que son mayor número de casos con diferentes combinaciones y

a que cada sección eficaz tiene un comportamiento específico para cada caso. Por ejemplo, el comportamiento de la sección eficaz de absorción cuando varían la densidad y la temperatura del combustible es completamente diferente al de la sección eficaz de transporte para el mismo caso. Y a su vez también es diferente del comportamiento que pueda tener al variar la densidad y la concentración de boro. Sin olvidar tampoco que para cada grupo energético puede ser diferente.

Aún así, pueden extraerse ciertas características repetidas en varios ajustes que son las siguientes:

- La variable que más veces exige términos no lineales en el polinomio de ajuste es la densidad del moderador, que en numerosas ocasiones exige un término cuadrático ρ^2 para poder realizar el ajuste con la bondad suficiente. Este término aparece en la práctica totalidad de los ajustes finales, tanto en grupos rápidos como térmicos.
- La siguiente variable que más veces aparece con términos de orden dos es la concentración de boro, seguido de la temperatura de fuel que esporádicamente exige un término cuadrático o un término con raíz cuadrada.
- El efecto cruzado entre dos variables que en mayor número de ocasiones interviene en los ajustes es el correspondiente a densidad - concentración de boro, que aparece con bastante frecuencia. El siguiente efecto cruzado dual que más aparece es densidad - temperatura del moderador y concentración de boro - temperatura del moderador. En rarísimas ocasiones aparece la temperatura del combustible como parte de un efecto cruzado entre dos variables.
- En los casos en los que alguna variable, que suele ser la temperatura del moderador en grupos rápidos, tiene muy poca influencia es necesario introducir un efecto cruzado triple densidad - concentración de boro - temperatura del moderador para que ajuste correctamente todos los coeficientes del polinomio, ya que de no ponerlo el coeficiente de temperatura del moderador no estaría correctamente ajustado.

Cuando un parámetro depende en gran medida de una variable, por ejemplo la densidad del moderador, y apenas depende de otra, típicamente la temperatura del moderador, el ajuste doble entre ambas variables muchas veces no puede llevarse a cabo. Esto no implica que luego el polinomio final de ajuste propuesto no incluya un término en temperatura del moderador, pues muchas veces introduciendo un término cruzado triple, como acabamos de comentar permite que el ajuste se haga incorporando todas las variables. En los ajustes dobles entre una variable muy influyente y otra muy poco influyente lo que sucede no es que se tenga un bajo coeficiente de regresión R , sino que el valor del coeficiente que multiplica a la variable menos influyente se da con un margen de error muy abultado. En los programas estadísticos cuando se realiza un ajuste cada coeficiente se da de la forma $\beta_1 = \hat{\beta}_1 \pm \varepsilon$ donde β_1 representa el coeficiente expresado como la suma de un valor estimado $\hat{\beta}_1$ y un error ε asociado al ajuste y a la medida experimental de las variables, tanto dependientes (secciones eficaces) como independientes (condiciones operativas). Es

muy importante para tener un ajuste fidedigno que el margen de error ε sea al menos tres órdenes de magnitud inferior al valor estimado $\hat{\beta}_1$.

En los ajustes entre variables muy influyentes y poco influyentes sucede que se ajusta muy bien con la variable influyente, que es de la que realmente depende el parámetro a ajustar, mientras que para la variable poco influyente da un valor de ε del mismo orden de magnitud que $\hat{\beta}_1$ lo que hace inaceptable el ajuste. Eso sí, el coeficiente de regresión R es próximo a 1, porque realmente el ajuste con la variable influyente y que determina el comportamiento de la sección eficaz es bueno.

Veámoslo con un ejemplo. Vamos a hacer el ajuste de la sección eficaz de absorción para el grupo 1 de 2 en función de la densidad y de la temperatura del moderador. Los comandos de R que hay que introducir son:

```
tabla2g <- read.table ("2-1.tbl",header=TRUE)
grupo1de2dentm <- subset(tabla2g,grupo==1 & tf==900 & ppm==1500)
ajuste <- lm(xs.abs~dens+tm, data=grupo1de2dentm)
summary(ajuste)
```

La primera instrucción sirve para cargar en “tabla2g” la información existente en el archivo “2-1.tbl”, que son todas las secciones eficaces en dos grupos para todas las combinaciones de variables, según se ve en la figura 4.8. La siguiente instrucción sirve para seleccionar dentro de la tabla las combinaciones del grupo 1 en las que la temperatura del combustible es constante e igual a 900K y la concentración de boro a 1500 ppm. Así se seleccionan todos los valores con esas variables fijas y con las de densidad y temperatura de moderador variables. La tercera instrucción indica el ajuste que se quiere hacer, en este ejemplo se expresa la sección eficaz de absorción en función de la densidad y temperatura del moderador, para los datos volcados en el grupo donde se ha hecho la selección con el comando `subset`. Nótese que tiene haber una coherencia entre las variables no fijas del grupo seleccionado y las variables utilizadas para expresar la sección eficaz como función de ellas en el ajuste. Por último con la opción `summary` se muestra por pantalla la información relativa al ajuste realizado. Con ello lo que obtenemos es:

```
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  7.781e-03  1.801e-04  43.19   <2e-16 ***
dens         3.312e-06  6.598e-08  50.20   <2e-16 ***
tm           7.617e-08  3.048e-07   0.25    0.805
---
Signif. codes:  '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 5.555e-05 on 27 degrees of freedom
```

Multiple R-squared: 0.9894, Adjusted R-squared: 0.9886
 F-statistic: 1260 on 2 and 27 DF, p-value: < 2.2e-16

En esta tabla se tiene mucha información. En primer lugar se observa que bajo la columna **Estimate Std.** se tiene el valor estimado para el coeficiente de turno, que por orden de líneas se comprueba que es término independiente, coeficiente de densidad y coeficiente de temperatura del moderador. En la segunda columna viene el error para cada coeficiente, y para ver su importancia relativa se tiene el código visual que aparece al final de cada línea con asteriscos. Atendiendo a la leyenda se comprueba que si hay tres asteriscos el valor del error es tres órdenes de magnitud inferior al valor estimado y su efecto es irrelevante. Este es el caso óptimo que hay que buscar en un ajuste, que todos los coeficientes tengan esta característica. A medida que descende el número de asteriscos aumenta la influencia del error ya que empieza a acercarse más al valor estimado, hasta que no aparece ningún símbolo que indica que el error es del mismo orden que el valor estimado y su efecto está totalmente presente. No se puede proponer un polinomio de ajuste con tal rango de tolerancia para un coeficiente, que en el caso del ejemplo se observa que es incluso mayor que el valor estimado. Por eso en este caso el ajuste no es válido.

Sin embargo es también fácilmente comprobable que el coeficiente de regresión R tiene un valor muy bueno (0.9886) al estar muy próximo a 1. Esto indica que el ajuste de la sección eficaz de absorción con la variable que realmente es influyente que es la densidad es bueno, cosa que también se ve al analizar el valor del error respecto al valor estimado y ver que tiene los tres asteriscos. Esto es debido a la gran influencia de la variable densidad, y la casi nula influencia de la temperatura del moderador. Este aspecto se comprueba fácilmente viendo los rangos de variabilidad de los ajustes individuales, que a continuación reproducimos para acabar de aclarar este comportamiento.

Para obtener el porcentaje de variabilidad con respecto a una variable primero hay que seleccionar, igual que en el caso anterior, el grupo de datos en el que se fijan unas variables y sólo varía una. A continuación se introduce la operación que se quiere realizar, en este caso, valor máximo menos valor mínimo partido por el valor medio y todo multiplicado por 100. Así tenemos:

```
> grupo1de2den <- subset (tabla,grupo==1 & tf==900 & tm==580 &
  ppm==1500)
> grupo1de2tm <- subset (tabla,grupo==1 & tf==900 & ppm==1500
  & dens==670)
> ((max(grupo1de2den$xs.abs)-min(grupo1de2den$xs.abs))/mean
  (grupo1de2den$xs.abs))*100
> 15.23
> ((max(grupo1de2tm$xs.abs)-min(grupo1de2tm$xs.abs))/mean
  (grupo1de2tm$xs.abs))*100
```

> 0.072

Se ha calculado la variabilidad de la sección eficaz de absorción cuando sólo varía la densidad y se ve que vale un 15.23 % mientras que para la temperatura del moderador vale un 0.072 %, lo que justifica que dependa en mucha mayor medida de la densidad y casi no dependa de la temperatura del moderador y en consecuencia el ajuste con respecto a una variable de la que depende mucho y con otra de la que apenas depende sea prácticamente el mismo ajuste que el de la variable influyente a secas.

Otro aspecto fundamental en este tipo de ajustes ya se ha comentado que son los efectos cruzados, y la posible existencia de términos de orden superior en la función aproximante. El estudio para saber si su presencia es necesaria o si con un ajuste sencillo formado por un término en cada variable es suficiente para parametrizar la sección eficaz correspondiente, tiene una metodología particular.

A la hora de realizar un ajuste con más de una variable uno no puede saber *a priori* los efectos cruzados que puede haber entre variables o que términos no lineales va a exigir cada variable. Por ello el primer ajuste que se propone es el más simple posible: un polinomio lineal en todas las variables. Hagamos este estudio es paralelo con otro ejemplo para que sea más ilustrativo.

Supongamos que queremos realizar el ajuste de la sección eficaz de fisión para el grupo 1 de 4 cuando varían la densidad del moderador, la concentración de boro y la temperatura del combustible. Según lo dicho, en primer lugar proponemos un polinomio lineal en todos los términos. Las instrucciones a introducir son por tanto:

```
tabla4g <- read.table ("4-1.tbl",header=TRUE)
grupo1de4denppmtf <- subset(tabla4g,grupo==1 & tm==580)
ajuste <- lm(xs.fiss~dens+ppm+tf, data=grupo1de4denppmtf)
summary(ajuste)
```

Y lo que obtenemos por pantalla es la siguiente tabla:

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	2.784e-03	1.931e-06	1442.12	<2e-16 ***
dens	2.984e-07	1.619e-09	184.278	<2e-16 ***
ppm	3.742e-09	2.915e-10	12.838	<2e-16 ***
tf	1.201e-09	1.760e-09	0.682	0.496

Signif. codes: '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 3.339e-06 on 176 degrees of freedom
 Multiple R-squared: 0.9949, Adjusted R-squared: 0.9948
 F-statistic: 1.137e+04 on 3 and 176 DF, p-value: < 2.2e-16

Se comprueba que el ajuste no es bueno ya que el coeficiente de temperatura de combustible (T_f) tiene un error muy abultado con respecto al valor estimado, y por ende no tiene ningún asterisco que indica un mal ajuste. Para mejorar el ajuste lo que hay que hacer a continuación es analizar el gráfico de los residuos, con respecto a la variable más influyente, en este caso la densidad. Los residuos, como se indicó al explicar los fundamentos de la técnica de mínimos cuadrados, son la diferencia entre el valor calculado según la funcionalización propuesta y el valor real (en nuestro caso los valores obtenidos en los outputs de NEWT). Para que ajuste sea bueno los residuos tienen que estar distribuidos de manera aleatoria, sin ajustarse a ninguna distribución o función matemática. Introducimos una instrucción para que el programa R nos muestre la forma de los residuos en un gráfico. Esta instrucción es la siguiente:

```
plot(xs.fiss-ajuste$fit~dens,grupolde4denppmtf)
```

Y el gráfico que obtenemos puede verse en la figura 5.11.

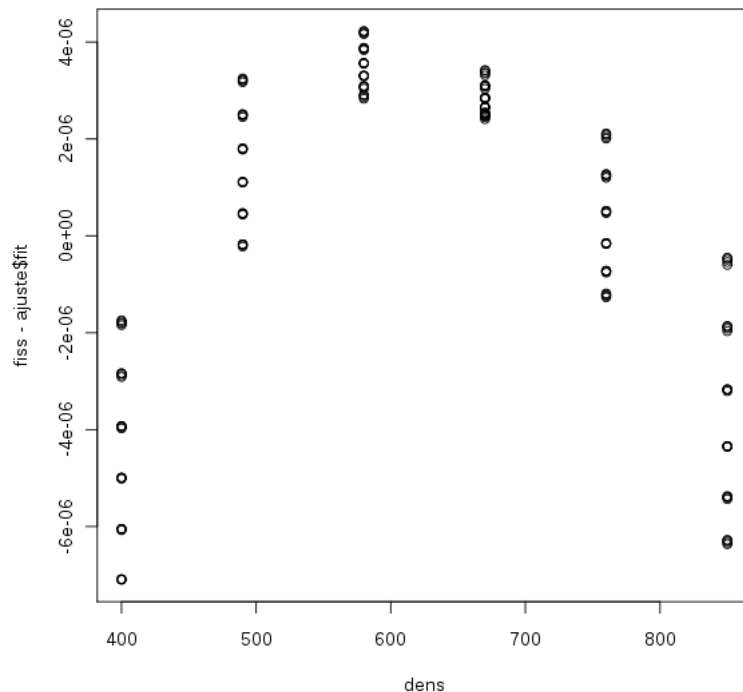


Figura 5.11: Gráfico de los residuos frente a la densidad

Es totalmente evidente que la distribución de los residuos en este gráfico no es en

absoluto aleatoria y que se ajusta a una parábola, o lo que es lo mismo a un polinomio de grado dos. Por ello en el ajuste anterior tenemos que añadir un término de orden dos en la densidad, y ver si así el ajuste que se obtiene es válido. Por tanto procedemos:

```
ajuste <- lm(xs.fiss~dens+ppm+tf+I(dens^2), grupo1de4denppmtf)
summary (ajuste)
```

La información para el nuevo ajuste es:

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	2.730e-03	2.066e-06	1321.16	<2e-16 ***
dens	4.839e-07	6.508e-09	74.350	<2e-16 ***
ppm	3.742e-09	1.225e-10	30.543	<2e-16 ***
tf	1.201e-09	7.398e-10	1.624	0.106
I(dens^2)	-1.484e-10	5.178e-12	-28.656	<2e-16 ***

Signif. codes: '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 1.404e-06 on 175 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.9991, Adjusted R-squared: 0.9991

F-statistic: 4.849e+04 on 4 and 175 DF, p-value: < 2.2e-16

Vemos que el ajuste en términos generales ha mejorado al incrementarse el valor del coeficiente de regresión. Sin embargo, el ajuste sigue sin ser idóneo ya que el coeficiente de la temperatura del combustible sigue sin estar correctamente estimado. Cabe preguntarse en este punto si será que en el ajuste falta un término cruzado que haga que todos los coeficientes verifiquen que su error asociado no sea significativo. Para saber si entre dos variables hay un efecto cruzado es necesario mirar de nuevo el gráfico de los residuos frente a ambas variables. Habrá efecto cruzado entre aquellas dos variables cuyos gráficos de residuos tengan la forma de un reloj de arena invertido. Analicemos pues, para este ajuste los gráficos de los residuos, empezando por la densidad.

```
plot(xs.fiss-ajuste$fit~dens, grupo1de4denppmtf)
```

Y el gráfico que obtenemos puede verse en la figura 5.12.

Se comprueba que la forma de los residuos frente a la densidad tiene una forma típicamente de reloj de arena invertido que indica que tiene un efecto cruzado con alguna otra variable. Tenemos que averiguar ahora con que variable tiene la relación. Probamos con la siguiente, que es la concentración de boro. De nuevo, introducimos la instrucción para que nos dibuje los residuos esta vez para la variable ppm:

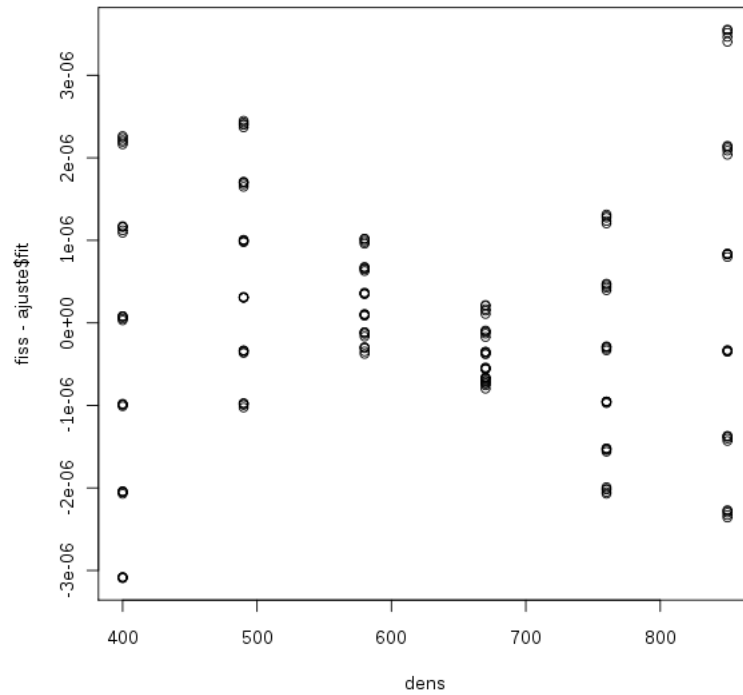


Figura 5.12: Gráfico de los residuos frente a la densidad para determinar un efecto cruzado

```
plot(xs.fiss-ajuste$fit~ppm, grupo1de4denppmtf)
```

Y el gráfico que aparece por pantalla está recogido en la figura 5.13

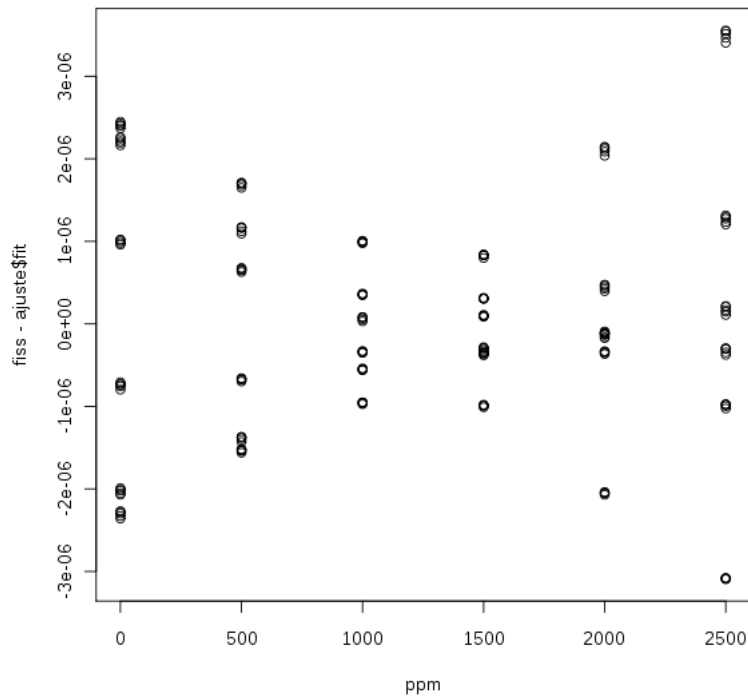


Figura 5.13: Gráfico de los residuos frente a la concentración de boro para determinar un efecto cruzado

En la figura 5.13 se descubre que la variable que tiene un efecto cruzado con la densidad es la concentración de boro al tener los residuos distribuidos de la misma forma característica. Por tanto en el ajuste metemos dicho efecto cruzado.

```
ajuste <- lm(xs.fiss~dens+ppm+tf+I(dens^2)+I(dens*ppm), grupo1de4denppmtf)
summary(ajuste)
```

Y la información del ajuste es:

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	2.738e-03	7.503e-07	3648.80	<2e-16 ***
dens	4.715e-07	2.289e-09	205.99	<2e-16 ***
ppm	-2.440e-09	1.784e-10	-13.68	<2e-16 ***
tf	1.201e-09	2.572e-10	4.674	6e-06 ***
I(dens^2)	-1.484e-10	1.800e-12	-82.42	<2e-16 ***
I(dens*ppm)	9.891e-12	2.771e-13	35.69	<2e-16 ***

Signif. codes: '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 4.880e-07 on 174 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.9999, Adjusted R-squared: 0.9999

F-statistic: 3.212e+05 on 5 and 174 DF, p-value: < 2.2e-16

Y se comprueba fácilmente que es el ajuste definitivo al estar todos los términos perfectamente ajustados. Por tanto el polinomio de ajuste final para este caso particular de la sección eficaz de fisión sería:

$$\Sigma_{fiss} = 2,738 \cdot 10^{-3} + 4,715 \cdot 10^{-7} \rho - 2,44 \cdot 10^{-9} ppm + 1,201 \cdot 10^{-9} T_f - 1,484 \cdot 10^{-10} \rho^2 + 9,891 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm$$

5.5. Ejemplo del ajuste completo para una sección eficaz

A continuación se va a mostrar el proceso completo de ajuste a modo de ejemplo para una determinada sección eficaz. Se va a realizar un ejemplo para un grupo rápido y otro para un grupo térmico y poder analizar así las diferencias y similitudes entre ambos. El ejemplo se va a realizar con la sección eficaz de transporte para los grupos 1 de 8 (rápido) y 7 de 8 (térmico).

GRUPO 1 DE 8

Varía densidad

Variabilidad(%): 26.93

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 5,499 \cdot 10^{-2} + 5,257 \cdot 10^{-5} \rho$

Coeficiente de regresión $R = 1$

Varía concentración de boro

Variabilidad(%): 0.0329

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 9,026 \cdot 10^{-2} - 1,186 \cdot 10^{-8} ppm$

Coeficiente de regresión $R = 0,9925$

Varía temperatura de moderador

Variabilidad(%): 0.00033

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 9,024 \cdot 10^{-2} + 3,457 \cdot 10^{-9} T_m$

Coeficiente de regresión $R = 0,9639$

Varía temperatura del combustible

Variabilidad(%): 0.00631

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 9,026 \cdot 10^{-2} - 1,42 \cdot 10^{-8} T_f$

Coeficiente de regresión $R = 0,9968$

Varían densidad y concentración de boro

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 5,446 \cdot 10^{-2} + 5,441 \cdot 10^{-5} \rho - 1,089 \cdot 10^{-8} ppm - 1,462 \cdot 10^{-9} \rho^2$

Coefficiente de regresión $R = 1$

Varían densidad y temperatura del moderador

No hay polinomio de ajuste

Varían densidad y temperatura del combustible

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 5,446 \cdot 10^{-2} + 5,442 \cdot 10^{-5} \rho - 1,418 \cdot 10^{-8} T_f - 1,477 \cdot 10^{-9} \rho^2$

Coefficiente de regresión $R = 1$

Varían concentración de boro y temperatura del moderador

Polinomio de ajuste:

$\Sigma_{trans} = 9,026 \cdot 10^{-2} - 8,653 \cdot 10^{-9} ppm + 2,673 \cdot 10^{-9} T_m - 1,284 \cdot 10^{-12} ppm^2$

Coefficiente de regresión $R = 0,9999$

Varían concentración de boro y temperatura del combustible

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 9,027 \cdot 10^{-2} - 1,183 \cdot 10^{-8} ppm - 1,353 \cdot 10^{-8} T_f$

Coefficiente de regresión $R = 0,9927$

Varían temperatura del moderador y del combustible

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 9,026 \cdot 10^{-2} + 3,535 \cdot 10^{-9} T_m - 2,295 \cdot 10^{-8} T_f + 4,748 \cdot 10^{-12} T_f^2$

Coefficiente de regresión $R = 0,9992$

Varían densidad, concentración de boro y temperatura de moderador

Polinomio de ajuste:

$\Sigma_{trans} = 5,436 \cdot 10^{-2} + 5,449 \cdot 10^{-5} \rho + 2,926 \cdot 10^{-8} ppm + 9,007 \cdot 10^{-8} T_m - 1,462 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 1,119 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$

Coefficiente de regresión $R = 1$

Varían densidad, concentración de boro y temperatura del combustible

Polinomio de ajuste:

$\Sigma_{trans} = 5,442 \cdot 10^{-2} + 5,45 \cdot 10^{-5} \rho + 3,202 \cdot 10^{-8} ppm - 1,357 \cdot 10^{-8} T_f - 1,463 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 6,864 \cdot 10^{-11} \rho \cdot ppm$

Coefficiente de regresión $R = 1$

Varían densidad, temperatura del moderador y del combustible

Polinomio de ajuste:

$\Sigma_{trans} = 5,445 \cdot 10^{-2} + 5,443 \cdot 10^{-5} \rho + 1,062 \cdot 10^{-8} T_m - 9,336 \cdot 10^{-9} T_f - 1,478 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 1,306 \cdot 10^{-14} \rho \cdot T_m \cdot T_f$

Coefficiente de regresión $R = 1$

Varían concentración de boro, temperatura del moderador y del combustible

Polinomio de ajuste:

$$\Sigma_{trans} = 9,027 \cdot 10^{-2} - 7,217 \cdot 10^{-9} ppm + 5,771 \cdot 10^{-9} T_m - 1,184 \cdot 10^{-8} T_f - 1,268 \cdot 10^{-12} ppm^2 - 2,836 \cdot 10^{-15} ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Coeficiente de regresión $R = 0,9997$

Varían todas las variables

Polinomio de ajuste final propuesto:

$$\Sigma_{trans} = 5,437 \cdot 10^{-2} + 5,45 \cdot 10^{-5} \rho + 3,043 \cdot 10^{-8} ppm + 9,231 \cdot 10^{-8} T_m - 1,361 \cdot 10^{-8} T_f - 1,462 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 1,148 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Coeficiente de regresión $R = 1$

GRUPO 7 DE 8

Varía densidad

Variabilidad (%): 53.06

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,1649 + 7,396 \cdot 10^{-4} \rho$

Coeficiente de regresión $R = 1$

Varía concentración de boro

Variabilidad (%): 1.312

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,6549 + 3,461 \cdot 10^{-6} ppm$

Coeficiente de regresión $R = 0,9998$

Varía temperatura del moderador

Variabilidad (%): 0.9872

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,6189 + 7,076 \cdot 10^{-5} T_m$

Coeficiente de regresión $R = 0,9986$

Varía temperatura del combustible

Variabilidad (%): 0.013

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,6598 + 1,993 \cdot 10^{-7} T_f$

Coeficiente de regresión $R = 0,7851$

Varían densidad y concentración de boro

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,1605 + 7,389 \cdot 10^{-4} \rho + 3,243 \cdot 10^{-6} ppm$

Coeficiente de regresión $R = 1$

Varían densidad y temperatura del moderador

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,1277 + 7,386 \cdot 10^{-4} \rho + 6,517 \cdot 10^{-5} T_m$

Coeficiente de regresión $R = 1$

Varían densidad y temperatura del combustible

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,172 + 7,146 \cdot 10^{-4} \rho + 2,274 \cdot 10^{-7} T_f + 2,006 \cdot 10^{-8} \rho^2$

Coeficiente de regresión $R = 1$

Varían concentración de boro y temperatura del moderador

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,6136 + 3,478 \cdot 10^{-6} ppm + 7,102 \cdot 10^{-5} T_m$

Coefficiente de regresión $R = 0,9993$

Varían concentración de boro y temperatura del combustible

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,6547 + 3,295 \cdot 10^{-6} ppm + 2,099 \cdot 10^{-7} T_f + 6,67 \cdot 10^{-11} ppm^2$

Coefficiente de regresión $R = 1$

Varían temperatura del moderador y del combustible

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,5934 + 1,597 \cdot 10^{-4} T_m + 2,147 \cdot 10^{-7} T_f - 7,795 \cdot 10^{-8} T_m^2$

Coefficiente de regresión $R = 0,9994$

Varían densidad, concentración de boro y temperatura de moderador

Polinomio de ajuste: $\Sigma_{trans} = 0,1231 + 7,379 \cdot 10^{-4} \rho + 3,257 \cdot 10^{-6} ppm + 6,538 \cdot 10^{-5} T_m$

Coefficiente de regresión $R = 0,9999$

Varían densidad, concentración de boro y temperatura del combustible

Polinomio de ajuste:

$\Sigma_{trans} = 0,1637 + 7,363 \cdot 10^{-4} \rho + 1,885 \cdot 10^{-6} ppm - 1,705 \cdot 10^{-6} T_f + 2,441 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_f$

Coefficiente de regresión $R = 1$

Varían densidad, temperatura del moderador y del combustible

Polinomio de ajuste:

$\Sigma_{trans} = 0,1803 + 6,411 \cdot 10^{-4} \rho - 1,43 \cdot 10^{-5} T_m + 2,38 \cdot 10^{-7} T_f + 1,989 \cdot 10^{-8} \rho^2 + 1,268 \cdot 10^{-7} \rho \cdot T_m$

Coefficiente de regresión $R = 1$

Varían concentración de boro, temperatura del moderador y del combustible

Polinomio de ajuste:

$\Sigma_{trans} = 0,6135 + 3,471 \cdot 10^{-6} ppm + 7,077 \cdot 10^{-5} T_m + 2,192 \cdot 10^{-7} T_f$

Coefficiente de regresión $R = 0,9996$

Varían todas las variables

Polinomio de ajuste final propuesto:

$\Sigma_{trans} = 0,1788 + 6,349 \cdot 10^{-4} \rho + 1,19 \cdot 10^{-6} ppm - 1,416 \cdot 10^{-5} T_m + 2,307 \cdot 10^{-7} T_f - 2,099 \cdot 10^{-8} \rho^2 + 3,298 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm + 1,269 \cdot 10^{-7} \rho \cdot T_m$

Coefficiente de regresión $R = 1$

5.6. Polinomios de ajuste propuestos para las secciones eficaces y factores de discontinuidad

Una vez analizado el proceso que se sigue para funcionalizar cada una de las secciones eficaces y factores de discontinuidad, sólo queda por expresar cada uno de los polinomios

de ajuste para cada uno de los parámetros a funcionalizar. Para hacerlo de una manera sistemática y ordenada se va a hacer una clasificación según los grupos de energía.

5.6.1. Dos grupos de energía

GRUPO 1 DE 2

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 6,492 \cdot 10^{-3} + 5,824 \cdot 10^{-6} \rho - 4,749 \cdot 10^{-8} ppm + 6,979 \cdot 10^{-8} T_m + 4,809 \cdot 10^{-7} T_f - 2,6 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 4,982 \cdot 10^{-10} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,1215 + 1,313 \cdot 10^{-4} \rho - 5,279 \cdot 10^{-8} ppm + 5,851 \cdot 10^{-7} T_m + 1,168 \cdot 10^{-7} T_f + 1,177 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 2,283 \cdot 10^{-3} + 1,495 \cdot 10^{-6} \rho - 2,118 \cdot 10^{-9} ppm + 3,347 \cdot 10^{-8} T_m + 2,209 \cdot 10^{-9} T_f - 7,203 \cdot 10^{-10} \rho^2 - 9,918 \cdot 10^{-13} ppm^2 + 2,617 \cdot 10^{-11} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 1

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 1} = 0,1505 + 4,976 \cdot 10^{-4} \rho - 7,704 \cdot 10^{-7} ppm + 8,093 \cdot 10^{-7} T_m + 6,655 \cdot 10^{-7} T_f + 3,527 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 2

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 2} = -3,221 \cdot 10^{-3} + 2,733 \cdot 10^{-5} \rho + 9,567 \cdot 10^{-8} ppm + 6,072 \cdot 10^{-7} T_m - 1,857 \cdot 10^{-7} T_f$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,001 + 1,579 \cdot 10^{-5} \rho - 3,783 \cdot 10^{-7} ppm + 2,099 \cdot 10^{-7} T_m - 1,544 \cdot 10^{-7} T_f + 3,115 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 9,575 \cdot 10^{-10} \rho \cdot ppm$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 1,001 - 1,139 \cdot 10^{-5} \rho + 2,078 \cdot 10^{-7} ppm + 8,22 \cdot 10^{-7} T_m + 1,457 \cdot 10^{-7} T_f - 6,135 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 9,588 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 3,482 \cdot 10^{-8} + 4,112 \cdot 10^{-11} \rho + 3,936 \cdot 10^{-13} ppm + 2,31 \cdot 10^{-12} T_m - 7,784 \cdot 10^{-13} T_f - 1,999 \cdot 10^{-14} \rho^2$$

GRUPO 2 DE 2

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 0,1011 + 5,334 \cdot 10^{-5} \rho - 1,514 \cdot 10^{-6} ppm - 4,234 \cdot 10^{-5} T_m - 4,479 \cdot 10^{-7} T_f - 2,04 \cdot 10^{-8} \rho^2 + 1,447 \cdot 10^{-8} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 9,718 \cdot 10^{-2} + 1,235 \cdot 10^{-3} \rho + 3,747 \cdot 10^{-6} ppm + 9,603 \cdot 10^{-5} T_m - 1,058 \cdot 10^{-6} T_f + 6,051 \cdot 10^{-8} \rho^2 - 6,747 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm - 3,796 \cdot 10^{-7} \rho \cdot T_m$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 6,431 \cdot 10^{-2} + 3,132 \cdot 10^{-5} \rho - 7,152 \cdot 10^{-7} ppm - 2,42 \cdot 10^{-5} T_m - 2,985 \cdot 10^{-7} T_f -$$

$$1,522 \cdot 10^{-8} \rho^2$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 1

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 1} = -1,438 \cdot 10^{-3} + 2,562 \cdot 10^{-2} \rho + 1,108 \cdot 10^{-7} ppm + 4,984 \cdot 10^{-6} T_m + 4,108 \cdot 10^{-7} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 2

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 2} = -1,127 \cdot 10^{-2} + 1,921 \cdot 10^{-3} \rho + 5,061 \cdot 10^{-6} ppm + 1,311 \cdot 10^{-4} T_m - 1,065 \cdot 10^{-6} T_f + 9,133 \cdot 10^{-8} \rho^2 - 2,082 \cdot 10^{-8} \rho \cdot ppm - 4,87 \cdot 10^{-7} \rho \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,019 + 2,417 \cdot 10^{-5} \rho - 1,111 \cdot 10^{-6} ppm - 1,432 \cdot 10^{-5} T_m - 6,678 \cdot 10^{-7} T_f$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 0,9984 + 2,561 \cdot 10^{-5} \rho + 1,018 \cdot 10^{-6} ppm - 4,098 \cdot 10^{-6} T_m + 3,919 \cdot 10^{-7} T_f - 1,202 \cdot 10^{-8} \rho^2 - 3,352 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 2,388 \cdot 10^{-6} + 1,21 \cdot 10^{-9} \rho - 2,761 \cdot 10^{-11} ppm - 9,946 \cdot 10^{-10} T_m - 6,785 \cdot 10^{-12} T_f - 5,62 \cdot 10^{-13} \rho^2$$

5.6.2. Cuatro grupos de energía

GRUPO 1 DE 4

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 3,228 \cdot 10^{-3} + 7,958 \cdot 10^{-7} \rho - 3,96 \cdot 10^{-9} ppm - 2,104 \cdot 10^{-8} T_m + 1,548 \cdot 10^{-9} T_f - 1,331 \cdot 10^{-10} \rho^2 + 2,852 \cdot 10^{-14} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 6,804 \cdot 10^{-2} + 6,944 \cdot 10^{-5} \rho + 8,728 \cdot 10^{-8} ppm + 3,14 \cdot 10^{-7} T_m - 3,098 \cdot 10^{-8} T_f - 1,222 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 4,04 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 2,744 \cdot 10^{-3} + 4,72 \cdot 10^{-7} \rho - 2,214 \cdot 10^{-9} ppm - 1,185 \cdot 10^{-8} T_m + 1,198 \cdot 10^{-9} T_f - 1,484 \cdot 10^{-10} \rho^2 + 1,655 \cdot 10^{-14} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 1

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 1} = 8,046 \cdot 10^{-2} + 9,633 \cdot 10^{-5} \rho - 2,71 \cdot 10^{-8} ppm + 7,355 \cdot 10^{-8} T_m - 1,492 \cdot 10^{-8} T_f - 1,72 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 9,178 \cdot 10^{-14} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 2

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 2} = 1,723 \cdot 10^{-2} + 7,045 \cdot 10^{-5} \rho + 1,182 \cdot 10^{-7} ppm + 4,48 \cdot 10^{-7} T_m - 3,054 \cdot 10^{-8} T_f - 3,03 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 5,86 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 3

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 3} = 9,278 \cdot 10^{-8} + 7,135 \cdot 10^{-9} \rho + 9,866 \cdot 10^{-12} ppm + 3,612 \cdot 10^{-11} T_m - 2,209 \cdot 10^{-12} T_f - 3,77 \cdot 10^{-13} \rho^2 - 4,752 \cdot 10^{-17} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 4

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 4} = 6,968 \cdot 10^{-10} + 4,506 \cdot 10^{-11} \rho + 5,972 \cdot 10^{-14} ppm + 2,177 \cdot 10^{-13} T_m - 1,318 \cdot 10^{-14} T_f - 2,372 \cdot 10^{-15} \rho^2 - 2,865 \cdot 10^{-19} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,006 + 1,88 \cdot 10^{-5} \rho - 4,431 \cdot 10^{-7} ppm + 4,706 \cdot 10^{-7} T_m - 2,269 \cdot 10^{-7} T_f - 5,297 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 1,316 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 0,9995 - 1,246 \cdot 10^{-5} \rho + 2,254 \cdot 10^{-7} ppm + 1,096 \cdot 10^{-6} T_m + 1,484 \cdot 10^{-7} T_f - 7,658 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 1,264 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 5,252 \cdot 10^{-10} - 3,182 \cdot 10^{-14} \rho + 2,101 \cdot 10^{-16} ppm + 1,069 \cdot 10^{-15} T_m - 9,837 \cdot 10^{-17} T_f + 1,494 \cdot 10^{-17} \rho^2 - 1,402 \cdot 10^{-21} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

GRUPO 2 DE 4

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 4,18 \cdot 10^{-3} + 2,051 \cdot 10^{-6} \rho + 4,655 \cdot 10^{-9} ppm - 1,296 \cdot 10^{-7} T_m + 8,147 \cdot 10^{-7} T_f - 9,393 \cdot 10^{-10} \rho^2 - 1,595 \cdot 10^{-12} ppm^2 - 1,916 \cdot 10^{-10} T_f^2 + 1,771 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,1426 + 2,355 \cdot 10^{-4} \rho - 1,764 \cdot 10^{-7} ppm - 1,482 \cdot 10^{-6} T_m + 1,077 \cdot 10^{-6} T_f - 5,395 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 1,988 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 1,079 \cdot 10^{-3} + 1,717 \cdot 10^{-7} \rho + 5,96 \cdot 10^{-10} ppm - 1,018 \cdot 10^{-8} T_m - 4,426 \cdot 10^{-9} T_f - 8,506 \cdot 10^{-11} \rho^2 + 1,393 \cdot 10^{-14} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 2

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 2} = 0,1593 + 5,716 \cdot 10^{-4} \rho - 3,628 \cdot 10^{-7} ppm - 2,173 \cdot 10^{-6} T_m + 1,874 \cdot 10^{-6} T_f + 8,909 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 3

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 3} = -8,623 \cdot 10^{-4} + 5,736 \cdot 10^{-5} \rho - 2,151 \cdot 10^{-7} ppm - 1,049 \cdot 10^{-6} T_m - 2,423 \cdot 10^{-7} T_f + 1,386 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 4

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 4} = -7,641 \cdot 10^{-6} + 3,565 \cdot 10^{-7} \rho - 1,338 \cdot 10^{-9} ppm - 6,471 \cdot 10^{-9} T_m - 1,473 \cdot 10^{-9} T_f + 8,543 \cdot 10^{-15} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,002 + 1,429 \cdot 10^{-5} \rho - 1,758 \cdot 10^{-7} ppm - 6,343 \cdot 10^{-7} T_m - 5,708 \cdot 10^{-7} T_f + 5,019 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 1,469 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 0,9988 - 1,339 \cdot 10^{-5} \rho + 1,137 \cdot 10^{-7} ppm + 5,648 \cdot 10^{-7} T_m + 4,562 \cdot 10^{-7} T_f - 3,8 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 9,85 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 9,379 \cdot 10^{-9} + 1,823 \cdot 10^{-12} \rho + 6,414 \cdot 10^{-15} ppm - 1,111 \cdot 10^{-13} T_m - 5,305 \cdot 10^{-14} T_f - 9,442 \cdot 10^{-16} \rho^2 + 1,522 \cdot 10^{-19} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

GRUPO 3 DE 4

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 2,883 \cdot 10^{-2} + 1,362 \cdot 10^{-5} \rho - 3,481 \cdot 10^{-8} ppm - 2,559 \cdot 10^{-7} T_m + 1,976 \cdot 10^{-6} T_f - 5,801 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 1,975 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,1594 + 3,971 \cdot 10^{-4} \rho + 1,215 \cdot 10^{-6} ppm + 3,864 \cdot 10^{-6} T_m + 2,801 \cdot 10^{-6} T_f$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 9,649 \cdot 10^{-3} + 2,919 \cdot 10^{-7} \rho - 2,395 \cdot 10^{-9} ppm + 5,708 \cdot 10^{-8} T_m + 1,674 \cdot 10^{-7} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 3 al 3

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 3} = 0,1411 + 7,829 \cdot 10^{-4} \rho + 1,407 \cdot 10^{-7} ppm + 2,69 \cdot 10^{-7} T_m + 1,2 \cdot 10^{-6} T_f + 3,813 \cdot 10^{-10} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 3 al 4

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 4} = -6,658 \cdot 10^{-3} + 1,606 \cdot 10^{-4} \rho - 2,859 \cdot 10^{-7} ppm + 2,045 \cdot 10^{-6} T_m + 2,362 \cdot 10^{-7} T_f$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 0,9846 + 3,345 \cdot 10^{-5} \rho + 1,001 \cdot 10^{-7} ppm - 5,825 \cdot 10^{-7} T_f$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 1,013 - 2,016 \cdot 10^{-5} \rho - 8,482 \cdot 10^{-8} ppm + 4,55 \cdot 10^{-7} T_f$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 2,866 \cdot 10^{-7} + 7,391 \cdot 10^{-11} \rho - 5,5 \cdot 10^{-13} ppm + 8,949 \cdot 10^{-12} T_m + 3,324 \cdot 10^{-12} T_f - 3,716 \cdot 10^{-14} \rho^2 - 1,813 \cdot 10^{-15} T_f^2$$

GRUPO 4 DE 4

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 0,1011 + 5,334 \cdot 10^{-5} \rho - 1,514 \cdot 10^{-6} ppm - 4,234 \cdot 10^{-5} T_m - 4,479 \cdot 10^{-7} T_f - 2,04 \cdot 10^{-8} \rho^2 + 1,447 \cdot 10^{-8} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,2277 + 1,014 \cdot 10^{-3} \rho + 2,564 \cdot 10^{-6} ppm - 1,346 \cdot 10^{-4} T_m + 3,16 \cdot 10^{-6} T_f + 6,051 \cdot 10^{-8} \rho^2 - 9,363 \cdot 10^{-15} \rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 6,431 \cdot 10^{-2} + 3,132 \cdot 10^{-5} \rho - 7,152 \cdot 10^{-7} ppm - 2,42 \cdot 10^{-5} T_m - 2,985 \cdot 10^{-7} T_f - 1,522 \cdot 10^{-7} \rho^2$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 4 al 3

$$\Sigma_{s,4 \rightarrow 3} = -1,438 \cdot 10^{-3} + 2,562 \cdot 10^{-7} \rho + 1,108 \cdot 10^{-7} ppm + 4,984 \cdot 10^{-6} T_m + 4,108 \cdot 10^{-7} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 4 al 4

$$\Sigma_{s,4 \rightarrow 4} = -1,127 \cdot 10^{-2} + 1,921 \cdot 10^{-3} \rho + 5,061 \cdot 10^{-6} ppm + 1,311 \cdot 10^{-4} T_m - 1,065 \cdot 10^{-6} T_f + 9,133 \cdot 10^{-8} \rho^2 - 2,082 \cdot 10^{-8} \rho \cdot ppm - 4,87 \cdot 10^{-7} \rho \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 0,9843 + 2,417 \cdot 10^{-5} \rho + 1,111 \cdot 10^{-6} ppm - 1,432 \cdot 10^{-5} T_m - 6,679 \cdot 10^{-7} T_f$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 1,003 + 1,058 \cdot 10^{-5} \rho + 1,018 \cdot 10^{-6} ppm - 4,098 \cdot 10^{-6} T_m + 3,919 \cdot 10^{-7} T_f - 3,353 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 2,388 \cdot 10^{-6} + 1,21 \cdot 10^{-9}\rho - 2,761 \cdot 10^{-11}ppm - 9,946 \cdot 10^{-10}T_m - 6,785 \cdot 10^{-12}T_f - 5,62 \cdot 10^{-13}\rho^2$$

5.6.3. Ocho grupos de energía

GRUPO 1 DE 8

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 4,432 \cdot 10^{-3} + 9,791 \cdot 10^{-7}\rho - 3,917 \cdot 10^{-9}ppm - 1,9 \cdot 10^{-8}T_m + 1,222 \cdot 10^{-9}T_f + 2,619 \cdot 10^{-14}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 5,437 \cdot 10^{-2} + 5,45 \cdot 10^{-5}\rho + 3,043 \cdot 10^{-8}ppm + 9,231 \cdot 10^{-8}T_m - 1,361 \cdot 10^{-8}T_f - 1,462 \cdot 10^{-9}\rho^2 - 1,148 \cdot 10^{-13}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 3,873 \cdot 10^{-3} + 2,373 \cdot 10^{-7}\rho - 1,259 \cdot 10^{-9}ppm + 1,181 \cdot 10^{-9}T_m + 5,364 \cdot 10^{-10}T_f - 1,951 \cdot 10^{-11}\rho^2 + 5,005 \cdot 10^{-12}\rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 1

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 1} = 6,041 \cdot 10^{-2} + 5,615 \cdot 10^{-5}\rho + 8,426 \cdot 10^{-9}ppm + 9,459 \cdot 10^{-8}T_m - 2,08 \cdot 10^{-8}T_f - 1,5 \cdot 10^{-9}\rho^2 - 1,192 \cdot 10^{-13}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 2

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 2} = 1,389 \cdot 10^{-2} + 4,133 \cdot 10^{-5}\rho + 2,338 \cdot 10^{-8}ppm + 4,379 \cdot 10^{-8}T_m + 2,694 \cdot 10^{-8}T_f - 1,179 \cdot 10^{-9}\rho^2 - 6,256 \cdot 10^{-17}\rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 3

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 3} = 9,295 \cdot 10^{-3} + 2,34 \cdot 10^{-5}\rho + 9,767 \cdot 10^{-9}ppm + 2,942 \cdot 10^{-8}T_m + 1,786 \cdot 10^{-8}T_f - 6,941 \cdot 10^{-10}\rho^2 - 4,185 \cdot 10^{-17}\rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 4

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 4} = 2,755 \cdot 10^{-3} + 4,454 \cdot 10^{-7}\rho + 1,477 \cdot 10^{-10}ppm + 6,129 \cdot 10^{-10}T_m + 3,739 \cdot 10^{-10}T_f - 1,584 \cdot 10^{-11}\rho^2 - 9,27 \cdot 10^{-19}\rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 5

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 5} = 1,512 \cdot 10^{-8} + 2,504 \cdot 10^{-9}\rho + 9,253 \cdot 10^{-13}ppm + 2,988 \cdot 10^{-12}T_m + 1,893 \cdot 10^{-12}T_f - 8,539 \cdot 10^{-14}\rho^2 - 4,517 \cdot 10^{-21}\rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 6

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 6} = 9,009 \cdot 10^{-10} + 1,091 \cdot 10^{-10}\rho + 3,871 \cdot 10^{-14}ppm + 1,046 \cdot 10^{-13}T_m + 6,77 \cdot 10^{-14}T_f - 3,699 \cdot 10^{-15}\rho^2 - 1,594 \cdot 10^{-22}\rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 7

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 7} = 1,823 \cdot 10^{-10} + 1,27 \cdot 10^{-11}\rho + 3,659 \cdot 10^{-15}ppm + 8,72 \cdot 10^{-15}T_m + 6,051 \cdot 10^{-15}T_f - 4,266 \cdot 10^{-16}\rho^2 - 1,347 \cdot 10^{-23}\rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 1 al 8

$$\Sigma_{s,1 \rightarrow 8} = 1,42 \cdot 10^{-10} + 4,156 \cdot 10^{-12}\rho + 5,221 \cdot 10^{-16}ppm - 1,724 \cdot 10^{-15}T_m - 5,736 \cdot$$

$$10^{-16}T_f - 1,355 \cdot 10^{-16}\rho^2 + 2,335 \cdot 10^{-24}\rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,007 + 1,496 \cdot 10^{-5}\rho - 4,261 \cdot 10^{-7}ppm + 4,727 \cdot 10^{-7}T_m - 2,282 \cdot 10^{-7}T_f + 1,291 \cdot 10^{-9}\rho \cdot ppm$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 0,9996 - 8,477 \cdot 10^{-6}\rho + 2,146 \cdot 10^{-7}ppm + 1,053 \cdot 10^{-6}T_m + 1,471 \cdot 10^{-7}T_f - 9,918 \cdot 10^{-9}\rho^2 - 1,241 \cdot 10^{-12}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 3,867 \cdot 10^{-10} - 7,461 \cdot 10^{-15}\rho + 1,366 \cdot 10^{-16}ppm - 2,236 \cdot 10^{-17}T_f + 3,384 \cdot 10^{-18}\rho^2 - 9,407 \cdot 10^{-21}ppm^2 - 2,979 \cdot 10^{-19}\rho \cdot ppm$$

GRUPO 2 DE 8

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 2,537 \cdot 10^{-3} + 3,121 \cdot 10^{-7}\rho - 5,345 \cdot 10^{-10}ppm - 7,149 \cdot 10^{-9}T_m + 5,525 \cdot 10^{-10}T_f - 7,406 \cdot 10^{-11}\rho^2 + 1,01 \cdot 10^{-14}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 7,909 \cdot 10^{-2} + 9,283 \cdot 10^{-5}\rho + 3,813 \cdot 10^{-8}ppm + 1,008 \cdot 10^{-7}T_m - 1,673 \cdot 10^{-8}T_f - 2,017 \cdot 10^{-9}\rho^2 - 1,257 \cdot 10^{-13}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 2,003 \cdot 10^{-3} + 3,099 \cdot 10^{-7}\rho - 6,71 \cdot 10^{-10}ppm - 5,163 \cdot 10^{-9}T_m + 6,529 \cdot 10^{-10}T_f - 8,764 \cdot 10^{-11}\rho^2 + 7,464 \cdot 10^{-15}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 2

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 2} = 8,408 \cdot 10^{-2} + 9,713 \cdot 10^{-5}\rho + 3,858 \cdot 10^{-9}ppm - 4,671 \cdot 10^{-8}T_m - 4,648 \cdot 10^{-9}T_f - 1,775 \cdot 10^{-9}\rho^2 + 6,637 \cdot 10^{-14}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 3

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 3} = 2,086 \cdot 10^{-2} + 1,041 \cdot 10^{-4}\rho + 5,358 \cdot 10^{-8}ppm + 2,174 \cdot 10^{-7}T_m - 1,833 \cdot 10^{-8}T_f - 3,452 \cdot 10^{-9}\rho^2 - 2,872 \cdot 10^{-13}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 4

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 4} = 2,315 \cdot 10^{-5} + 1,765 \cdot 10^{-6}\rho + 6,881 \cdot 10^{-10}ppm + 2,735 \cdot 10^{-9}T_m - 1,934 \cdot 10^{-10}T_f - 6,524 \cdot 10^{-11}\rho^2 - 3,684 \cdot 10^{-15}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 5

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 5} = 4,319 \cdot 10^{-8} + 9,949 \cdot 10^{-9}\rho + 3,868 \cdot 10^{-12}ppm + 1,53 \cdot 10^{-11}T_m - 1,074 \cdot 10^{-12}T_f - 3,7 \cdot 10^{-13}\rho^2 - 2,062 \cdot 10^{-17}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 6

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 6} = 1,828 \cdot 10^{-9} + 4,309 \cdot 10^{-10}\rho + 1,674 \cdot 10^{-13}ppm + 6,615 \cdot 10^{-13}T_m - 4,63 \cdot 10^{-14}T_f - 1,603 \cdot 10^{-14}\rho^2 - 8,923 \cdot 10^{-19}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 7

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 7} = 2,373 \cdot 10^{-10} + 4,962 \cdot 10^{-11}\rho + 1,929 \cdot 10^{-14}ppm + 7,62 \cdot 10^{-14}T_m - 5,355 \cdot 10^{-15}T_f - 1,845 \cdot 10^{-15}\rho^2 - 1,028 \cdot 10^{-19}\rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 2 al 8

$$\Sigma_{s,2 \rightarrow 8} = 9,918 \cdot 10^{-11} + 1,567 \cdot 10^{-11} \rho + 6,093 \cdot 10^{-15} ppm + 2,406 \cdot 10^{-14} T_m - 1,69 \cdot 10^{-15} T_f - 5,825 \cdot 10^{-16} \rho^2 - 3,247 \cdot 10^{-20} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,006 + 2,015 \cdot 10^{-5} \rho - 4,094 \cdot 10^{-7} ppm - 1,242 \cdot 10^{-6} T_m - 2,243 \cdot 10^{-7} T_f - 7,949 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 2,18 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 0,9996 - 1,545 \cdot 10^{-5} \rho + 2,375 \cdot 10^{-7} ppm + 1,151 \cdot 10^{-6} T_m + 1,488 \cdot 10^{-7} T_f - 6,057 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 1,304 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 6,064 \cdot 10^{-10} - 1,108 \cdot 10^{-14} \rho + 3,907 \cdot 10^{-17} ppm - 3,753 \cdot 10^{-17} T_f + 5,288 \cdot 10^{-18} \rho^2 - 2,361 \cdot 10^{-19} \rho \cdot ppm$$

GRUPO 3 DE 8

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 1,731 \cdot 10^{-3} + 3,265 \cdot 10^{-8} \rho + 6,828 \cdot 10^{-10} ppm - 1,581 \cdot 10^{-8} T_m + 6,824 \cdot 10^{-9} T_f - 5,542 \cdot 10^{-12} \rho^2 + 2,079 \cdot 10^{-14} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,1308 + 1,907 \cdot 10^{-4} \rho - 5,387 \cdot 10^{-8} ppm - 6,484 \cdot 10^{-7} T_m + 1,34 \cdot 10^{-7} T_f - 2,702 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 8,634 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 4 \cdot 10^{-4} + 5,199 \cdot 10^{-9} \rho + 4,049 \cdot 10^{-11} ppm - 3,146 \cdot 10^{-10} T_m + 6,544 \cdot 10^{-11} T_f + 3,321 \cdot 10^{-12} \rho^2 + 4,594 \cdot 10^{-16} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 3 al 3

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 3} = 0,1513 + 3,823 \cdot 10^{-4} \rho - 5,058 \cdot 10^{-8} ppm - 5,217 \cdot 10^{-7} T_m - 1,891 \cdot 10^{-7} T_f - 6,372 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 6,945 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 3 al 4

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 4} = 2,587 \cdot 10^{-3} + 9,395 \cdot 10^{-5} \rho - 1,536 \cdot 10^{-7} ppm - 8,164 \cdot 10^{-7} T_m + 7,254 \cdot 10^{-8} T_f - 5,198 \cdot 10^{-10} \rho^2 - 1,074 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 3 al 5

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 5} = 7,515 \cdot 10^{-6} + 5,227 \cdot 10^{-7} \rho - 8,558 \cdot 10^{-10} ppm - 4,431 \cdot 10^{-9} T_m + 3,844 \cdot 10^{-10} T_f - 2,932 \cdot 10^{-12} \rho^2 - 5,828 \cdot 10^{-15} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 3 al 6

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 6} = 3,255 \cdot 10^{-7} + 2,264 \cdot 10^{-8} \rho - 3,708 \cdot 10^{-11} ppm - 1,919 \cdot 10^{-10} T_m + 1,664 \cdot 10^{-11} T_f - 1,27 \cdot 10^{-13} \rho^2 + 2,524 \cdot 10^{-16} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 3 al 7

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 7} = 3,748 \cdot 10^{-8} + 2,607 \cdot 10^{-9} \rho - 4,27 \cdot 10^{-12} ppm - 2,21 \cdot 10^{-11} T_m + 1,917 \cdot 10^{-12} T_f - 1,462 \cdot 10^{-14} \rho^2 + 2,907 \cdot 10^{-19} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 3 al 8

$$\Sigma_{s,3 \rightarrow 8} = 1,184 \cdot 10^{-8} + 8,232 \cdot 10^{-10} \rho - 1,348 \cdot 10^{-12} ppm - 6,949 \cdot 10^{-12} T_m + 6,051 \cdot 10^{-13} T_f - 4,616 \cdot 10^{-15} \rho^2 + 9,178 \cdot 10^{-18} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,006 + 1,192 \cdot 10^{-5} \rho - 3,771 \cdot 10^{-7} ppm + 2,426 \cdot 10^{-7} T_m - 1,41 \cdot 10^{-7} T_f + 1,419 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 1,001 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 0,9987 - 1,788 \cdot 10^{-5} \rho + 2,303 \cdot 10^{-7} ppm + 9,182 \cdot 10^{-7} T_m + 1,09 \cdot 10^{-7} T_f - 1,118 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 1,949 \cdot 10^{-9} - 9,384 \cdot 10^{-14} \rho + 5,557 \cdot 10^{-16} ppm - 5,12 \cdot 10^{-15} T_m + 1,04 \cdot 10^{-15} T_f + 4,765 \cdot 10^{-17} \rho^2 + 6,995 \cdot 10^{-21} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

GRUPO 4 DE 8

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 9,455 \cdot 10^{-3} + 4,7 \cdot 10^{-6} \rho + 2,407 \cdot 10^{-8} ppm - 1,592 \cdot 10^{-7} T_m + 1,226 \cdot 10^{-6} T_f - 2,121 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 2,341 \cdot 10^{-16} \rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,1674 + 3,716 \cdot 10^{-4} \rho + 3,573 \cdot 10^{-8} ppm - 2,18 \cdot 10^{-7} T_m + 9,492 \cdot 10^{-6} T_f - 9,043 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 2,141 \cdot 10^{-9} + 4,849 \cdot 10^{-16} \rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 2,443 \cdot 10^{-3} + 9,705 \cdot 10^{-8} \rho + 2,796 \cdot 10^{-9} ppm - 7,17 \cdot 10^{-9} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 4 al 4

$$\Sigma_{s,4 \rightarrow 4} = 0,1627 + 7,647 \cdot 10^{-4} \rho + 1,349 \cdot 10^{-7} ppm + 5,087 \cdot 10^{-7} T_m + 5,264 \cdot 10^{-6} T_f - 8,73 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 5,8 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 4 al 5

$$\Sigma_{s,4 \rightarrow 5} = -1,158 \cdot 10^{-3} + 1,485 \cdot 10^{-4} \rho - 1,402 \cdot 10^{-7} ppm - 6,762 \cdot 10^{-7} T_m - 4,255 \cdot 10^{-7} T_f + 1,846 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 8,94 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 4 al 6

$$\Sigma_{s,4 \rightarrow 6} = -9,243 \cdot 10^{-5} + 6,348 \cdot 10^{-6} \rho - 5,986 \cdot 10^{-9} ppm - 2,84 \cdot 10^{-8} T_m - 1,768 \cdot 10^{-8} T_f + 8,447 \cdot 10^{-11} \rho^2 + 3,753 \cdot 10^{-14} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 4 al 7

$$\Sigma_{s,4 \rightarrow 7} = -1,064 \cdot 10^{-5} + 7,31 \cdot 10^{-7} \rho - 6,893 \cdot 10^{-10} ppm - 3,271 \cdot 10^{-9} T_m - 2,036 \cdot 10^{-9} T_f + 9,727 \cdot 10^{-12} \rho^2 + 4,322 \cdot 10^{-15} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 4 al 8

$$\Sigma_{s,4 \rightarrow 8} = -3,361 \cdot 10^{-6} + 2,308 \cdot 10^{-7} \rho - 2,176 \cdot 10^{-10} ppm - 1,033 \cdot 10^{-9} T_m - 6,428 \cdot 10^{-10} T_f + 3,072 \cdot 10^{-12} \rho^2 + 1,364 \cdot 10^{-15} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 0,9936 + 1,92 \cdot 10^{-5} \rho - 2,493 \cdot 10^{-7} ppm + 1,04 \cdot 10^{-7} T_f + 1,041 \cdot 10^{-8} \rho^2 + 6,061 \cdot 10^{-10} \rho \cdot ppm$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 0,9996 - 1,278 \cdot 10^{-5} \rho + 2,09 \cdot 10^{-7} ppm + 1,351 \cdot 10^{-7} T_f - 4,38 \cdot 10^{-9} \rho^2 - 5,093 \cdot 10^{-10} \rho \cdot ppm$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 2,876 \cdot 10^{-8} + 2,876 \cdot 10^{-12} \rho + 7,161 \cdot 10^{-15} ppm - 5,448 \cdot 10^{-14} T_m - 9,12 \cdot 10^{-14} T_f - 1,475 \cdot 10^{-15} \rho^2 - 2,132 \cdot 10^{-18} ppm^2 + 7,482 \cdot 10^{-20} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

GRUPO 5 DE 8

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 3,407 \cdot 10^{-2} + 2,558 \cdot 10^{-5} \rho + 1,494 \cdot 10^{-7} ppm - 9,828 \cdot 10^{-7} T_m + 2,573 \cdot 10^{-6} T_f - 1,129 \cdot 10^{-8} \rho^2 + 1,386 \cdot 10^{-15} \rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,1717 + 3,893 \cdot 10^{-4} \rho + 1,752 \cdot 10^{-7} ppm - 1,142 \cdot 10^{-6} T_m + 3,769 \cdot 10^{-6} T_f - 9,4 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 1,605 \cdot 10^{-15} \rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 9,79 \cdot 10^{-3} + 1,176 \cdot 10^{-6} \rho + 6,617 \cdot 10^{-10} ppm + 5,048 \cdot 10^{-7} T_f - 6,051 \cdot 10^{-10} \rho^2 - 1,34 \cdot 10^{-10} T_f^2$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 5 al 5

$$\Sigma_{s,5 \rightarrow 5} = 0,1456 + 6,789 \cdot 10^{-4} \rho + 1,015 \cdot 10^{-7} ppm + 2,676 \cdot 10^{-6} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 5 al 6

$$\Sigma_{s,5 \rightarrow 6} = -3,917 \cdot 10^{-3} + 2,247 \cdot 10^{-4} \rho - 6,991 \cdot 10^{-8} ppm - 1,328 \cdot 10^{-7} T_m - 2,77 \cdot 10^{-7} T_f + 4,977 \cdot 10^{-9} \rho^2 + 1,856 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 5 al 7

$$\Sigma_{s,5 \rightarrow 7} = -6,181 \cdot 10^{-4} + 2,542 \cdot 10^{-5} \rho - 7,415 \cdot 10^{-9} ppm - 1,316 \cdot 10^{-8} T_m - 3,052 \cdot 10^{-8} T_f + 6,15 \cdot 10^{-10} \rho^2 + 1,857 \cdot 10^{-14} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 5 al 8

$$\Sigma_{s,5 \rightarrow 8} = -1,952 \cdot 10^{-4} + 8,027 \cdot 10^{-6} \rho - 2,34 \cdot 10^{-9} ppm - 4,163 \cdot 10^{-9} T_m - 9,638 \cdot 10^{-9} T_f + 1,942 \cdot 10^{-10} \rho^2 + 5,86 \cdot 10^{-15} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 0,9805 + 4,614 \cdot 10^{-5} \rho - 1,682 \cdot 10^{-7} ppm - 5,863 \cdot 10^{-7} T_m - 1,046 \cdot 10^{-7} T_f + 7,873 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 1,015 - 2,383 \cdot 10^{-5} \rho + 1,544 \cdot 10^{-7} ppm + 5,181 \cdot 10^{-7} T_m + 3,634 \cdot 10^{-7} T_f - 6,897 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 1,548 \cdot 10^{-7} + 1,942 \cdot 10^{-11} \rho - 5,133 \cdot 10^{-14} ppm - 3,517 \cdot 10^{-13} T_f - 9,604 \cdot 10^{-15} \rho^2 + 7,499 \cdot 10^{-17} \rho \cdot ppm$$

GRUPO 6 DE 8

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 1,844 \cdot 10^{-2} + 2,085 \cdot 10^{-6} \rho - 3,323 \cdot 10^{-8} ppm + 2,825 \cdot 10^{-7} T_m + 7,078 \cdot 10^{-8} T_f + 3,386 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,1412 + 4,236 \cdot 10^{-4} \rho + 5,883 \cdot 10^{-7} ppm + 9,981 \cdot 10^{-6} T_m - 1,828 \cdot 10^{-6} T_f + 2,545 \cdot 10^{-12} \rho \cdot ppm \cdot T_f$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 8,756 \cdot 10^{-3} + 2,81 \cdot 10^{-7} \rho - 1,105 \cdot 10^{-8} ppm + 2,084 \cdot 10^{-7} T_m + 1,624 \cdot 10^{-8} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 6 al 6

$$\Sigma_{s,6 \rightarrow 6} = 0,1249 + 6,068 \cdot 10^{-4} \rho + 3,454 \cdot 10^{-7} ppm + 7,596 \cdot 10^{-6} T_m - 4,877 \cdot 10^{-7} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 6 al 7

$$\Sigma_{s,6 \rightarrow 7} = -1,622 \cdot 10^{-4} + 2,802 \cdot 10^{-4} \rho - 2,475 \cdot 10^{-7} ppm + 1,853 \cdot 10^{-6} T_m + 4,635 \cdot 10^{-7} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 6 al 8

$$\Sigma_{s,6 \rightarrow 8} = -3,386 \cdot 10^{-4} + 5,998 \cdot 10^{-5} \rho - 3,806 \cdot 10^{-9} ppm - 1,628 \cdot 10^{-7} T_m + 1,677 \cdot 10^{-8} T_f + 1,574 \cdot 10^{-10} \rho^2 - 5,512 \cdot 10^{-11} \rho \cdot ppm - 4,608 \cdot 10^{-9} \rho \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,002 - 2,144 \cdot 10^{-5} \rho - 2,089 \cdot 10^{-7} ppm + 3,881 \cdot 10^{-7} T_m - 1,319 \cdot 10^{-6} T_f + 2,758 \cdot 10^{-8} \rho^2 + 4,188 \cdot 10^{-10} \rho \cdot ppm$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 1,004 + 5,58 \cdot 10^{-6} \rho + 1,544 \cdot 10^{-7} ppm + 4,071 \cdot 10^{-7} T_m + 5,908 \cdot 10^{-7} T_f - 1,504 \cdot 10^{-8} \rho^2 - 6,2 \cdot 10^{-13} \rho \cdot ppm \cdot T_m$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 5,684 \cdot 10^{-7} + 8,217 \cdot 10^{-12} \rho - 4,028 \cdot 10^{-13} ppm + 7,758 \cdot 10^{-12} T_m + 2,962 \cdot 10^{-13} T_f$$

GRUPO 7 DE 8

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 5,468 \cdot 10^{-2} + 9,898 \cdot 10^{-6} \rho - 2,435 \cdot 10^{-7} ppm + 6,312 \cdot 10^{-6} T_m + 2,032 \cdot 10^{-7} T_f + 8,135 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,1788 + 6,349 \cdot 10^{-4} \rho + 1,19 \cdot 10^{-6} ppm - 1,416 \cdot 10^{-5} T_m + 2,307 \cdot 10^{-7} T_f + 2,099 \cdot 10^{-8} \rho^2 + 3,298 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm + 1,269 \cdot 10^{-7} \rho \cdot T_m$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 3,545 \cdot 10^{-2} + 3,114 \cdot 10^{-6} \rho - 1,698 \cdot 10^{-7} ppm + 3,674 \cdot 10^{-6} T_m + 1,474 \cdot 10^{-7} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 7 al 6

$$\Sigma_{s,7 \rightarrow 6} = -2,336 \cdot 10^{-3} + 2,863 \cdot 10^{-6} \rho + 1,219 \cdot 10^{-7} ppm + 7,399 \cdot 10^{-6} T_m + 8,674 \cdot 10^{-7} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 7 al 7

$$\Sigma_{s,7 \rightarrow 7} = 0,1006 + 7,736 \cdot 10^{-4} \rho + 1,348 \cdot 10^{-6} ppm + 4,785 \cdot 10^{-5} T_m - 2,063 \cdot 10^{-6} T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 7 al 8

$$\Sigma_{s,7 \rightarrow 8} = -1,464 \cdot 10^{-2} + 4,132 \cdot 10^{-4} \rho + 2,422 \cdot 10^{-6} ppm + 3,016 \cdot 10^{-6} T_m + 8,094 \cdot 10^{-7} T_f + 3,741 \cdot 10^{-8} \rho^2 - 8,449 \cdot 10^{-9} \rho \cdot ppm$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,012 + 1,286 \cdot 10^{-5} \rho + 8,329 \cdot 10^{-7} ppm - 9,682 \cdot 10^{-6} T_m - 1,432 \cdot 10^{-6} T_f$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 0,9927 + 8,359 \cdot 10^{-6}\rho + 7,761 \cdot 10^{-7}ppm + 1,388 \cdot 10^{-5}T_m + 2,543 \cdot 10^{-7}T_f - 6,905 \cdot 10^{-9}\rho^2 - 2,241 \cdot 10^{-9}\rho \cdot ppm$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 1,309 \cdot 10^{-6} + 1,013 \cdot 10^{-10}\rho - 5,128 \cdot 10^{-12}ppm + 7,95 \cdot 10^{-11}T_m$$

GRUPO 8 DE 8

Sección eficaz de absorción

$$\Sigma_{abs} = 0,143 + 1,315 \cdot 10^{-5}\rho - 6,646 \cdot 10^{-7}ppm - 3,661 \cdot 10^{-5}T_m - 5,66 \cdot 10^{-7}T_f + 1,911 \cdot 10^{-8}\rho \cdot ppm$$

Sección eficaz de transporte

$$\Sigma_{trans} = 0,2844 + 1,354 \cdot 10^{-3}\rho + 3,072 \cdot 10^{-6}ppm - 1,223 \cdot 10^{-4}T_m - 6,531 \cdot 10^{-6}T_f + 1,505 \cdot 10^{-14}\rho \cdot ppm \cdot T_m \cdot T_f$$

Sección eficaz de fisión

$$\Sigma_{fis} = 9,295 \cdot 10^{-2} + 2,095 \cdot 10^{-6}\rho - 2,323 \cdot 10^{-7}ppm - 2,073 \cdot 10^{-5}T_m - 4,258 \cdot 10^{-7}T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 8 al 6

$$\Sigma_{s,8 \rightarrow 6} = 9,39 \cdot 10^{-6} - 5,51 \cdot 10^{-8}\rho + 1,724 \cdot 10^{-11}ppm - 3,382 \cdot 10^{-8}T_m + 1,483 \cdot 10^{-11}T_f + 3,066 \cdot 10^{-11}T_m^2 + 1,123 \cdot 10^{-10}\rho \cdot T_m$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 8 al 7

$$\Sigma_{s,8 \rightarrow 7} = -0,1894 + 1,45 \cdot 10^{-4}\rho + 4,458 \cdot 10^{-7}ppm + 3,399 \cdot 10^{-4}T_m + 4,063 \cdot 10^{-6}T_f$$

Sección eficaz de dispersión del grupo 8 al 8

$$\Sigma_{s,8 \rightarrow 8} = 4,281 \cdot 10^{-2} + 2,234 \cdot 10^{-3}\rho - 3,438 \cdot 10^{-6}ppm + 9,023 \cdot 10^{-5}T_m - 2,524 \cdot 10^{-6}T_f + 3,747 \cdot 10^{-8}\rho^2 - 7,966 \cdot 10^{-7}\rho \cdot T_m$$

Factor de discontinuidad N.E.

$$GET - NE = 1,023 + 1,843 \cdot 10^{-5}\rho - 9,201 \cdot 10^{-7}ppm - 3,622 \cdot 10^{-6}T_m + 6,368 \cdot 10^{-6}T_f - 3,502 \cdot 10^{-9}T_f^2 + 4,422 \cdot 10^{-9}\rho \cdot ppm$$

Factor de discontinuidad S.W.

$$GET - SW = 1,008 + 1,615 \cdot 10^{-5}\rho + 9,233 \cdot 10^{-7}ppm - 1,409 \cdot 10^{-5}T_m + 5,561 \cdot 10^{-7}T_f - 3,537 \cdot 10^{-9}\rho \cdot ppm$$

Inversa de la velocidad

$$\frac{1}{v} = 3,37 \cdot 10^{-6} + 4,206 \cdot 10^{-10}\rho - 1,022 \cdot 10^{-11}ppm - 8,634 \cdot 10^{-10}T_m - 3,39 \cdot 10^{-12}T_f - 2,079 \cdot 10^{-13}\rho^2$$

Capítulo 6

Valoración de la funcionalización obtenida con COBAYA3

El presente capítulo tiene por objeto valorar la librería parametrizada elaborada mediante su implementación en el código de difusión COBAYA3 y su comparación con la solución obtenida si se utiliza una librería tabulada. El cálculo a realizar con el *solver* ANDES de COBAYA3 es un cálculo nodal 3D con realimentación termohidráulica, aunque también se hará previamente un cálculo nodal a nivel 2D para comprobar que los valores obtenidos son similares a los de una librería tabulada.

6.1. Verificación a nivel 2D

6.1.1. Definición

6.1.1.1. Objetivo

El objetivo de esta primera prueba de contrastación es comprobar que los resultados obtenidos al ejecutar un caso en el código COBAYA3 cuando se emplea la librería parametrizada son análogos a los obtenidos cuando la librería es tabulada. El parámetro para contrastar ambas soluciones va a ser la k_{eff} , donde se va a analizar en qué orden difiere un caso del otro. El tipo de cálculo va a ser nodal 2D con un cuarto de elemento combustible con condición de contorno reflectiva, también denominada en red regular infinita, pues es como si viese en todas sus fronteras elementos iguales. Los cálculos 2D se han realizado en dos grupos de energía.

6.1.1.2. Descripción

Se van a realizar dos pruebas.

En primer lugar se van a ejecutar algunos casos aleatorios con unas determinadas condiciones de operación (densidad, concentración de boro, etc.). Por un lado, cuando se emplee la librería parametrizada el *solver* sustituirá los valores de las condiciones de

operación en los polinomios de ajuste propuestos; por otro lado, para esos mismos valores de condiciones de operación tenemos los valores reales de las secciones eficaces al estar recogidos en los outputs de NEWT. Por tanto los casos que se van a ejecutar tienen que ser casos cuyas variables de operación estén recogidas en la tabla 4.1, o lo que es lo mismo, que hayan sido empleados para realizar la parametrización. Esto ha de ser así para que así tengamos los valores reales de las secciones eficaces en un output de NEWT.

La otra prueba es comparar los resultados obtenidos utilizando la librería parametrizada con los obtenidos utilizando una librería tabulada en formato NEMTAB creada a partir de los outputs de NEWT empleando el programa en FORTRAN CREANEMTAB. Esta opción nos permitirá validar la librería parametrizada para combinaciones de valores intermedios no incluidos en los *data points*, cuando el código utilice la librería tabulada podrá realizar una operación de interpolación entre los valores más próximos.

6.1.2. Resultados

En la tabla 6.1 se muestran los casos que han sido escogidos para ejecutarlos en el código COBAYA3 y contrastar los resultados obtenidos. Los resultados hallados mediante ejecución del COBAYA3 al emplear directamente los outputs de NEWT se muestran en la tercera columna mientras que en la cuarta se muestran los obtenidos al emplear la librería parametrizada. En la segunda columna se ubica la combinación de variables para las que se realizan los cálculos. El orden de variables es: temperatura del combustible, temperatura del moderador, concentración de boro en ppms y densidad del moderador.

En la quinta y sexta columna se adjuntan las diferencias relativas entre ambos casos en términos de k_{eff} y en términos de reactividad, ambas en partes por cien mil (pcm). El valor Δk_{eff} es la diferencia entre la k_{eff} hallada empleando la librería parametrizada y la hallada mediante los outputs de NEWT, multiplicado por 10^5 . A partir de la relación entre reactividad y constante de criticidad, que recordamos era:

$$\rho = \frac{k - 1}{k}$$

tenemos que la diferencia de reactividades será por tanto:

$$\Delta\rho = \rho_1 - \rho_2 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 \cdot k_2} \cdot 10^5 (pcm)$$

Analizando los valores obtenidos podemos concluir lo siguiente:

- Por lo general, la diferencia entre ambos casos en la constante k_{eff} está en torno a las 100 pcms, siendo una diferencia no despreciable.

Caso	Combinación	k_{eff} (valores NEWT)	k_{eff} (lib.param)	Δk_{eff} (pcm)	$\Delta \rho$ (pcm)
1	900-580-1000-670	1.14136522	1.14263094	126.572	97.05
2	700-550-1500-850	1.09634352	1.09731611	97.259	80.84
3	800-525-2000-400	1.06308214	1.06209399	-98.815	-87.52
4	900-600-1500-760	1.09819493	1.09891927	72.434	60.02
5	1000-617-2500-490	1.04086333	1.03950471	-135.862	-125.57
6	1100-600-0-850	1.25393762	1.25125552	-268.21	-170.94
7	900-580-1500-580	1.10120828	1.10239418	118.59	97.69
8	1000-550-1500-670	1.09950581	1.10099861	149.28	123.32
9	800-580-500-760	1.19511611	1.19476488	-35.123	-24.6
10	1000-600-1000-760	1.14075253	1.14159052	83.799	64.35
11	900-600-1500-580	1.10111636	1.10226467	114.831	94.61
12	1100-525-1000-580	1.08981141	1.08983374	2.233	1.88
13	1100-580-1500-490	1.13061324	1.13096005	34.681	27.12
14	1000-525-0-490	1.18301713	1.18074123	-227.59	-162.93
15	800-617-2500-580	1.04239444	1.04111111	-128.33	-118.25

Tabla 6.1: Comparación de los resultados obtenidos en la k-eff en cálculos 2D

Caso	$\Sigma_{abs,1}$		$\Sigma_{abs,2}$		$\nu\Sigma_{f,1}$		$\nu\Sigma_{f,2}$	
-	NEWT	Lib. Par.	NEWT	Lib. Par.	NEWT	Lib. Par.	NEWT	Lib. Par.
1	0.00995	0.00995	0.110855	0.11092	7.573E-3	7.578E-3	0.15442	0.1546
2	0.01046	0.01046	0.12477	0.12433	7.802E-3	7.798E-3	0.1595	0.1593
3	0.0091	0.009099	0.10457	0.10515	7.048E-3	7.0521E-3	0.14577	0.1463
5	0.00971	0.009704	0.10994	0.1097	7.2925E-3	7.283E-3	0.14459	0.1437
7	0.0098	0.00979	0.11054	0.11054	7.4473E-3	7.4435E-3	0.15098	0.151
8	0.01014	0.01014	0.1163	0.11625	7.5867E-3	7.591E-3	0.15533	0.15546
10	0.010234	0.10233	0.11337	0.1135	7.6912E-3	7.697E-3	0.15517	0.15546
11	0.009807	0.009799	0.10975	0.10968	7.4488E-3	7.445E-3	0.14989	0.14985
13	0.009977	0.009977	0.10941	0.10936	7.430E-3	7.427E-3	0.155125	0.15505

Tabla 6.2: Secciones eficaces empleadas en los cálculos 2D

- Las mayores diferencias se obtienen cuando las combinaciones contienen valores extremos de las variables. De especial importancia es la diferencia cuando la concentración de boro es nula. En favor del trabajo realizado hay que decir que ésta es una situación anómala y que nunca se da en circunstancias normales ni transitorias en la operación de un reactor PWR, ya que siempre se tiene algo de ácido bórico disuelto. También cuando la concentración de boro es máxima, los valores difieren en mayor medida entre sí; hecho achacable precisamente al tomar el valor máximo.
- Para combinaciones con valores intermedios los errores son menores. Por ejemplo para los casos 2, 4, 7, 9, 10, 11, 12 y 13 con valores todos ellos intermedios, las diferencias son menores, no sobrepasando en la mayoría de ellos las 100 pcm en términos de k_{eff} y en ningún caso en términos de reactividad.

Es evidente que la diferencia en los cálculos estriba en los diferencia de valores de las secciones eficaces entre un caso y otro. A modo ilustrativo se adjunta la tabla 6.2 con algunos valores de secciones eficaces según los calculados por NEWT o por los ajustes de la librería parametrizada para el caso de dos grupos de energía.

Por otra parte, en la tabla 6.3 se exponen los resultados para algunos casos con valores intermedios. Esta opción se corresponde con el uso de la librería tabulada y la parametrizada, donde en la primera de ellas se realiza una interpolación.

Caso	Combinación	k_{eff} (lib.tab.)	k_{eff} (lib.param.)	$\Delta\rho$ (pcm)
1	950-590-1325-711	1.11481015	1.11375942	84.625
2	1024-569-1115-699	1.1308708	1.12975003	87.72
3	1003-609-984-721	1.14275019	1.14169123	81.16
4	884-587-2099-683	1.05802807	1.05763332	35.27
5	793-534-69-597	1.21235896	1.21382984	-99.95
6	921-541-1951-591	1.07304621	1.07190236	99.44
7	1085-613-2199-703	1.0438290	1.04449775	-61.337

Tabla 6.3: Comparación de los resultados obtenidos en la k_{eff} en 2D al emplear una librería tabulada y otra parametrizada

6.2. Verificación a nivel 3D

6.2.1. Definición

6.2.1.1. Objetivo

En este caso la verificación se hace a una escala tridimensional, es decir, que partimos de una situación en la que se tiene un elemento combustible con una altura determinada rodeado por un reflector. Ahora no se van a emplear valores de condiciones de operación puntuales, sino que se va a tener un perfil de éstas a lo largo de la altura según la potencia. Por ello van a emplearse de nuevo valores intermedios, no como en el primer caso anterior en el que los valores eran los mismos que se habían utilizado para obtener la parametrización de las secciones eficaces. En el caso de la librería parametrizada no hay alteración ninguna pues lo único que hay que hacer es sustituir los valores correspondientes en el polinomio de ajuste. Sin embargo, en la librería tabulada si que habrá que hacer de nuevo una operación de interpolación, debida precisamente al empleo de valores intermedios que no son justamente los que salen en la tabla de dicha librería. El objetivo de esta prueba consiste en comparar los resultados por ambos procedimientos y comprobar que son coherentes y consecuentes en un caso y otro. Esta disposición es sin duda la más realista y la que se va a utilizar en cálculos posteriores del proyecto NURISP.

Otro aspecto muy interesante es saber si se puede reducir del alguna forma el tamaño de la librería tabulada. Se ensayará con una librería en formato NEMTAB pero con menos valores de las variables que los fijados en la tabla 4.1, de forma que si los resultados obtenidos no difieren mucho de los hallados con los iniciales puede que compense reducir el número de opciones de cada variable, y por ende, el tamaño de la librería.

Caso	Combinación	k_{eff} (lib.tab.)	k_{eff} (lib.par.)	Δk_{eff} (pcm)	$\Delta\rho$ (pcm)
1	950-560-1000-752	1.13364572	1.13460225	95.653	74.3665
2	890-548-1325-684	1.10600833	1.10717124	116.291	94.67
3	1055-603-793-711	1.14050888	1.14212407	161.519	123.997
4	1088-613-2044-498	1.05693104	1.05657907	-35.197	-31.518
5	913-577-1857-594	1.06649643	1.06699702	50.059	43.9906
6	877-552-509-677	1.17981939	1.17981972	0.033	0.0237

Tabla 6.4: Comparación de los resultados obtenidos en la k-eff en 3D al emplear una librería tabulada y otra parametrizada en dos grupos de energía

Caso	Combinación	k_{eff} (lib.tab.)	k_{eff} (lib.par.)	Δk_{eff} (pcm)	$\Delta\rho$ (pcm)
1	950-560-1000-752	1.13285226	1.13346091	60.865	47.401
2	890-548-1325-684	1.10533487	1.10632807	99.32	81.22
3	1055-603-793-711	1.13956747	1.14086458	129.711	99.7706
4	1088-613-2044-498	1.05641216	1.05578364	-62.852	-56.3522
5	913-577-1857-594	1.06598523	1.06621206	22.683	19.9575
6	877-552-509-677	1.17896830	1.17894124	-2.706	-1.9475

Tabla 6.5: Comparación de los resultados obtenidos en la k-eff en 3D al emplear una librería tabulada y otra parametrizada en cuatro grupos de energía

6.2.2. Resultados

A diferencia del caso anterior bidimensional, en este modelo más realista al ser en 3D y con un acoplamiento termohidráulico vamos a comparar resultados analizando también el número de grupos con los que cuenta la librería correspondiente, para ver si esto pudiera ser influyente o no en el resultado final.

En primer lugar comenzamos con dos grupos de energía. En la tabla 6.4 se tienen los resultados para este caso, comparando los resultados obtenidos con la librería tabulada y la parametrizada. Se puede comprobar que las diferencias entre ambos modelos son del mismo orden que en el caso bidimensional.

A continuación ejecutamos los mismos casos pero en cuatro grupos, y los resultados obtenidos se presentan en la tabla 6.5.

Se puede comprobar que por lo general los resultados mejoran sensiblemente. Por ejemplo, ya en ningún caso la diferencia de reactividad supera las 100 pcm, y sólo en el caso 3

Caso	Combinación	k_{eff} (lib.tab.)	k_{eff} (lib.par.)	Δk_{eff} (pcm)	$\Delta\rho$ (pcm)
1	937-555-600-700	1.17096016	1.17076421	-19.595	-14.2933
2	1040-603-1300-640	1.10483792	1.10464862	-18.93	-15.51
3	840-540-2010-770	1.04966243	1.04979749	13.506	12.257
4	870-531-750-590	1.15927401	1.15908568	-18.833	-14.016
5	950-600-1110-490	1.11894461	1.11968941	74.48	59.447
6	1100-525-1000-530	1.13517284	1.13530106	12.822	9.95
7	975-575-1175-775	1.11806041	1.11783103	-22.938	-18.353
8	1100-610-5-510	1.19336967	1.19501034	164.07	115.04681

Tabla 6.6: Comparación de los resultados obtenidos en la k_{eff} en 3D al emplear una librería tabulada y otra parametrizada en ocho grupos de energía

la diferencia relativa entre las k_{eff} supera esa cifra. Por lo tanto parece que al aumentar el número de grupos de energía disminuye la diferencia entre modelos y los resultados son más próximos.

Seguimos con el proceso y ahora ejecutamos otros casos diferentes en ocho grupos para analizar si esta tendencia se mantiene y con ocho grupos las diferencias se minimizan. En la tabla 6.6 se tienen los resultados.

En efecto, lo que era esperable se confirma y se demuestra que al incrementar el número de grupos de energía con los que se hacen los cálculos de difusión neutrónica aumenta la precisión de los modelos y los resultados son más próximos. Como se puede apreciar en la tabla 6.6 las diferencias entre la k_{eff} dependiendo de la opción se reducen a las 15-20 pcm como término medio. Está como siempre la excepción del caso extremo número 8 que como ya se comentó con anterioridad no se corresponde con una situación real al apenas tener ácido bórico disuelto.

Con estos resultados se cierra de manera satisfactoria la verificación de la librería parametrizada confirmándose que su posible utilización en cálculos futuros es una opción muy viable. En este sentido puede mejorarse la librería parametrizada mediante técnicas de análisis de incertidumbre y de la varianza como se comentará en el capítulo 7. Desde luego, estos cálculos reflejan que la funcionalización de librerías de secciones eficaces para cálculos nodales de difusión para realizar análisis de núcleos es una opción sólida, exitosa y fiable como alternativa a las librerías tabuladas.

Como se comentó al describir la verificación tridimensional, en este caso como resultado del acoplamiento entre códigos neutrónico y termohidráulico se obtiene un perfil tanto de la potencia como de densidad y temperatura de moderador y combustible. La plata-

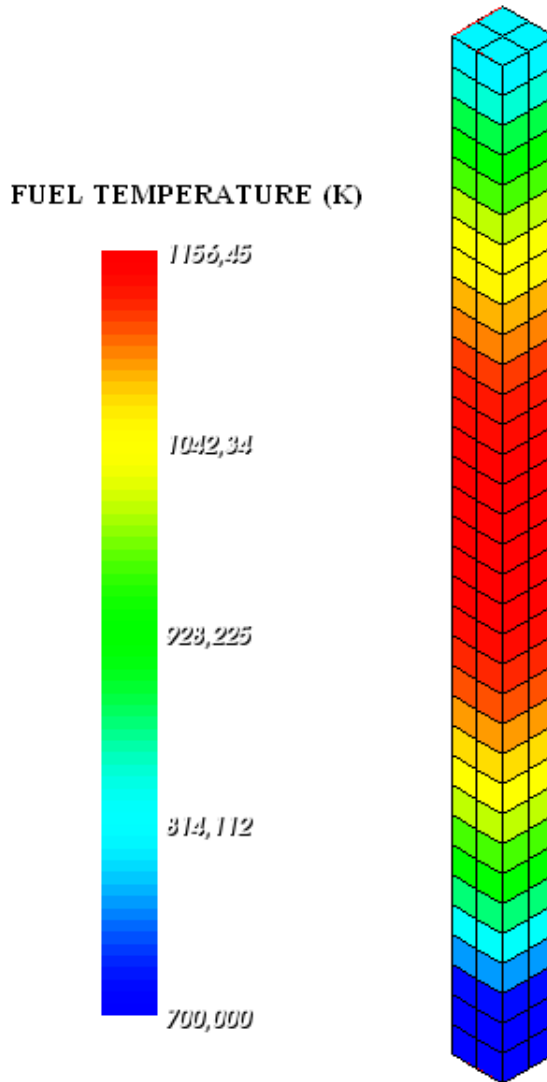


Figura 6.2: Perfil de temperatura del combustible en un elemento combustible en un cálculo 3D

forma SALOME permite mostrar unos gráficos con colores que representan de manera visual y amigable el perfil de todas ellas. En las figuras 6.2, 6.3, 6.4 y 6.5 se representan los perfiles de la temperatura del combustible, la del refrigerante, la densidad del moderador y la potencia a lo largo del elemento combustible. En ellas se puede ver la división axial que se ha hecho del elemento combustible en 34 alturas donde según la escala de colores está representada la temperatura, densidad o potencia de cada celda. Estas gráficas están hechas para el caso de temperatura de combustible al principio del elemento 700 K, temperatura de combustible a la entrada 570 K y densidad a la entrada 0.73 g/cm^3 .

En la figura 6.6 se presentan para el mismo caso los perfiles de temperatura del moderador, densidad y potencia del elemento combustible y se puede observar la correspondencia obvia de que a medida que aumenta la temperatura del moderador al atravesar

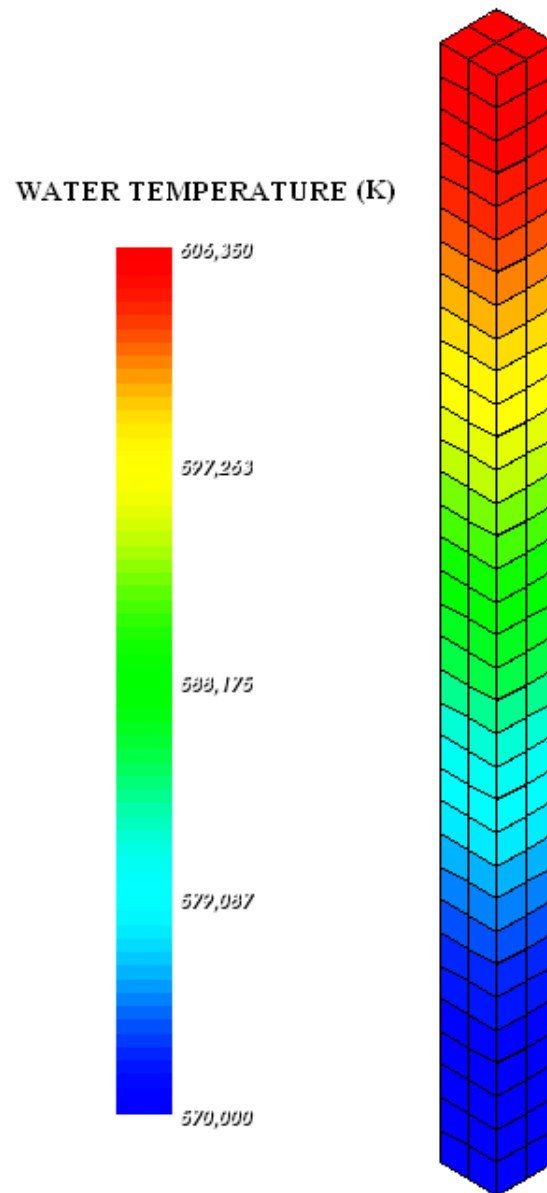


Figura 6.3: Perfil de temperatura del moderador en un elemento combustible en un cálculo 3D

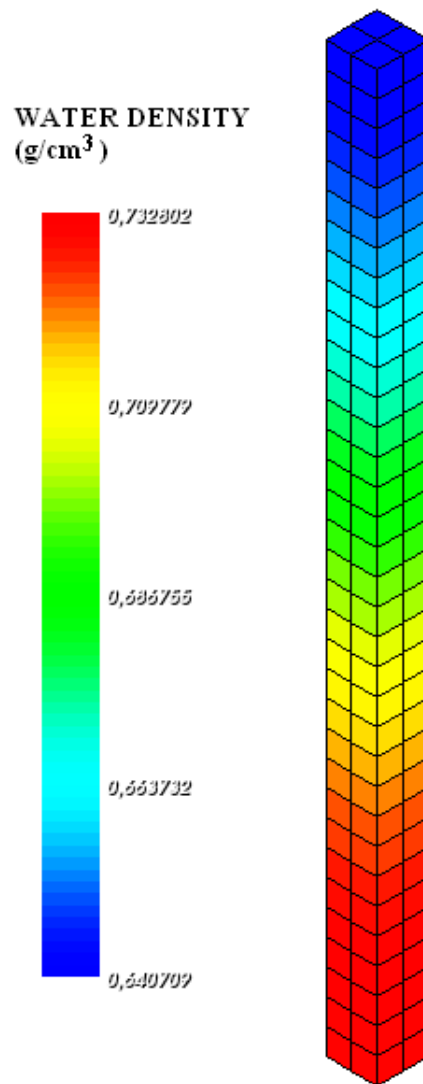


Figura 6.4: Perfil de la densidad del moderador en un elemento combustible en un cálculo 3D

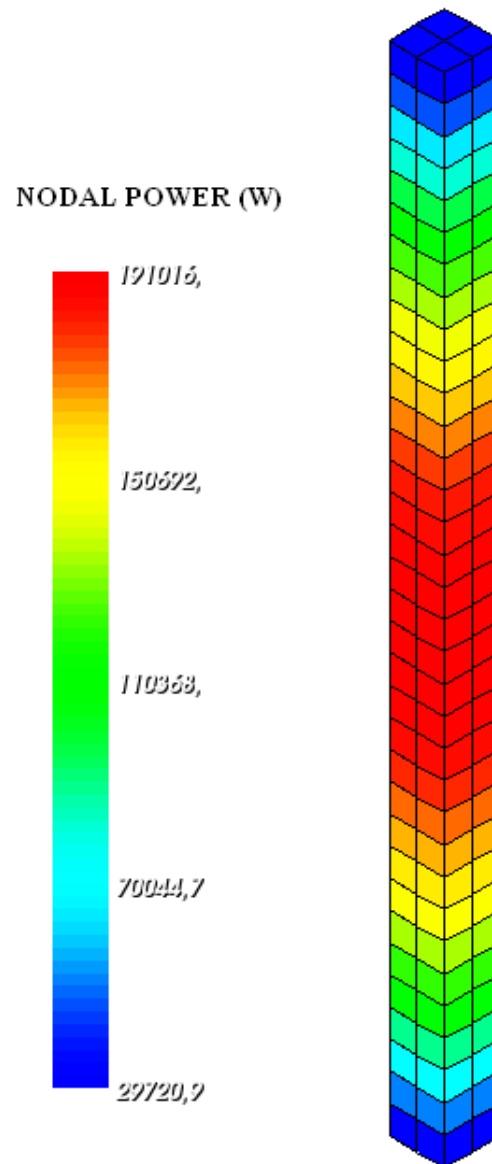


Figura 6.5: Perfil de la potencia en un elemento combustible en un cálculo 3D

el núcleo y absorber el calor generado en el combustible la densidad va disminuyendo del mismo. También se puede ver como la parte más caliente se corresponde con la zona central del elemento. Como se puede ver estos gráficos resultan muy intuitivos y ayudan notablemente en la realización de cálculos a diferentes niveles: nodal o de núcleo completo.

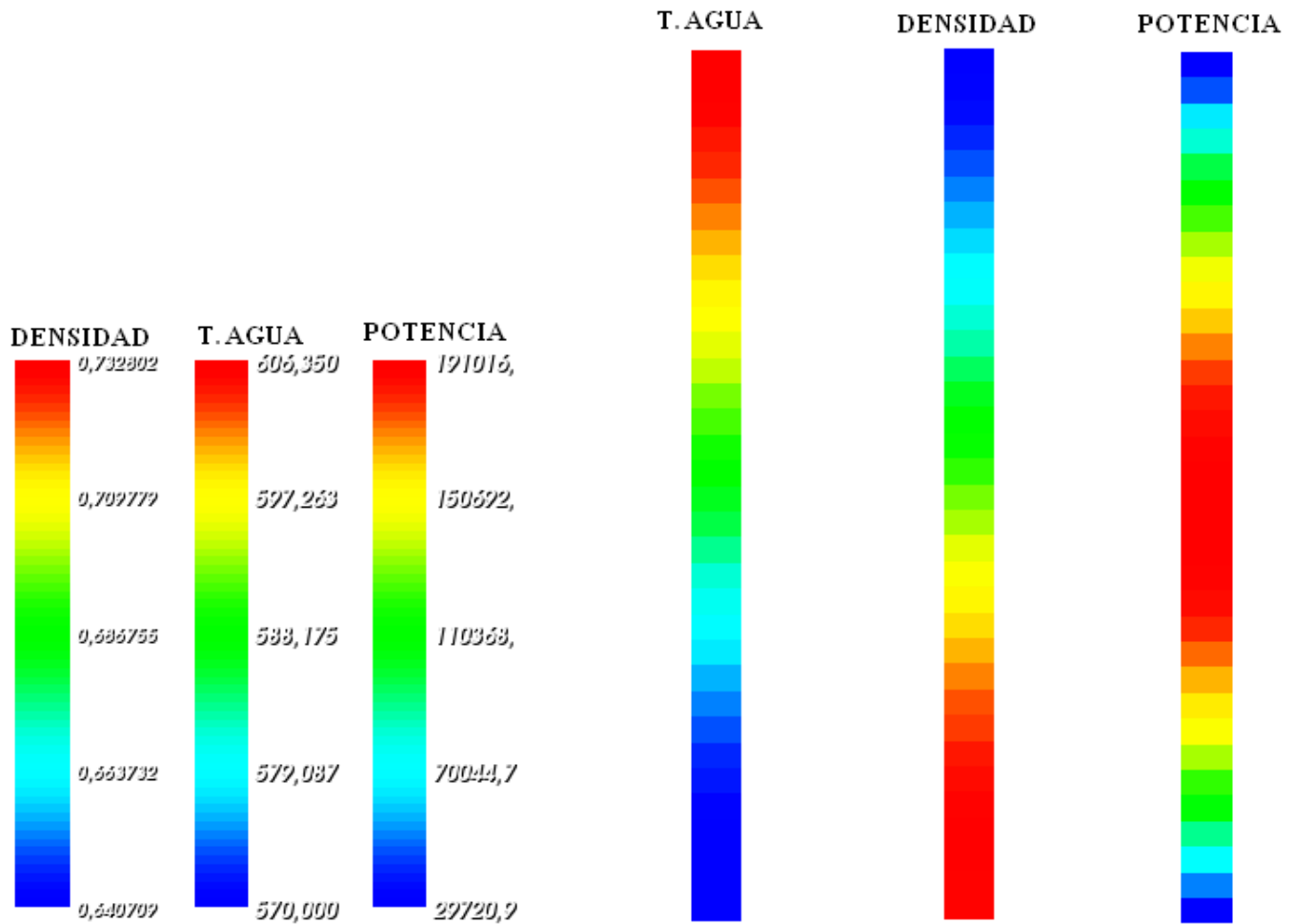


Figura 6.6: Comparación de los perfiles de potencia, temperatura y densidad del moderador en un cálculo 3D

Otro aspecto importante es, en el marco de las librerías tabuladas tratar de determinar cuál es el tamaño óptimo de dicha librería, para intentar almacenar sólo el número mínimo de valores de cada variable que permitan con suficiente precisión llevar a cabo cálculos completos. Para buscar esta tamaño óptimo vamos a ejecutar casos reduciendo

Densidad (g/cm^3)	Conc. boro (ppm)	Temp. mod. (K)	Temp. comb. (K)
0.4	0	525	700
0.58	1000	580	900
0.76	2000	617	1100
0.85	2500	—	—

Tabla 6.7: Valores de las variables con eliminación de puntos intermedios

Caso	k_1 (lib. comp.)	k_2 (lib. simp.)	k_3 (lib. par.)	$\Delta k = k_2 - k_1$	$\Delta k = k_3 - k_1$
1	1.17096016	1.17120473	1.17076421	24.457	-19.595
2	1.10483792	1.1050342	1.10464862	19.628	-18.93
3	1.04966243	1.0497009	1.04979749	3.847	13.506
4	1.15927401	1.15935378	1.15908568	7.977	-18.833
5	1.11894461	1.11911134	1.11968941	16.673	74.48
6	1.13517284	1.1351851	1.13530106	1.226	12.822
7	1.11806041	1.11833452	1.11783103	27.411	-22.938
8	1.19336967	1.19496958	1.19501034	159.99	164.07

Tabla 6.8: Comparación de resultados entre una librería tabulada con mayor y menor número de puntos

paulatinamente el número de valores en cada variable hasta que el error ya sea demasiado abultado, en cuyo caso ya no será válido, y el tamaño óptimo será el del caso anterior.

Este proceso comienza cuando suprimimos valores intermedios en cada variable. En primer lugar vamos a realizar el cálculo de difusión con una librería tabulada con los *data points* en la tabla 6.7 donde se han eliminado dos puntos intermedios en todas las variables.

En la tabla 6.8 vienen recogidos los resultados obtenidos, comparándolos con los que se obtuvieron con la librería “completa”, esto es, con todos los valores o *data points* presentes en la tabla 4.1 ; y con los de la librería parametrizada. También vienen reflejadas las diferencias de la k_{eff} expresadas en pcm, entre la librería tabulada simplificada y la completa, y también se han vuelto a poner los valores de diferencia entre la parametrizada y la tabulada completa para compararlos con los anteriores.

Se puede comprobar que la variación entre librerías tabuladas es globalmente mejor que entre la parametrizada y la tabulada completa ya que las diferencias son en término general menores, estando en ambos casos en las decenas de pcm. Por lo tanto esta simplificación en la librería tabulada puede darse como válida, con las ventajas que ello conlleva

Densidad (g/cm^3)	Conc. boro (ppm)	Temp. mod. (K)	Temp. comb. (K)
0.4	0	525	700
0.67	1500	580	900
0.85	2500	617	1100

Tabla 6.9: Valores de las variables con 3 puntos en cada una de ellas

Caso	k_1 (lib. comp.)	k_2 (lib. simp.)	k_3 (lib. par.)	$\Delta k = k_2 - k_1$	$\Delta k = k_3 - k_1$
1	1.17096016	1.17127534	1.17076421	31.518	-19.595
2	1.10483792	1.10582823	1.10464862	99.031	-18.93
3	1.04966243	1.04987448	1.04979749	21.205	13.506
4	1.15927401	1.15966849	1.15908568	39.448	-18.833
5	1.11894461	1.11990117	1.11968941	95.656	74.48
6	1.13517284	1.13554259	1.13530106	36.975	12.822
7	1.11806041	1.11828522	1.11783103	22.481	-22.938
8	1.19336967	1.1949199	1.19501034	155.02	164.07

Tabla 6.10: Comparación de resultados entre una librería tabulada con mayor y menor número de puntos

en cuanto a memoria necesaria y tiempos de cálculo.

Veamos ahora qué pasa cuando dejamos únicamente 3 puntos en cada variable. En este caso los diferentes puntos con los que se cuenta son los recogidos en la tabla 6.9, donde se ve que son los valores extremos y el punto intermedio de los presentes en la tabla 4.1. Los resultados se adjuntan en la tabla 6.10.

De un análisis a la tabla 6.10 se desprende que, evidentemente, las diferencias entre los resultados que se obtienen al emplear las dos librerías tabuladas son mayores, rozando en algunas casos las 100 pcm e incluso sobrepasando ese valor. Sin embargo en la última columna se muestra la diferencia entre la parametrizada y la completa y se observa que los valores son casi siempre menores que entre tabuladas, y en algunos casos por diferencias significativas. Así por ejemplo tenemos que para el caso número 1 la diferencia en esta última opción es de 51.113 pcm frente a las 19.6 del caso entre la parametrizada y la tabulada completa. De igual comportamiento son los casos número 2, 4, 5, 6, y 7. Esto indica que, globalmente, la librería parametrizada es más exacta y precisa que la librería tabulada simplificada. No obstante, estos resultados pueden seguir siendo algo elevados para cálculos de núcleo muy precisos; aspecto que se puede mejorar con técnicas de incertidumbre a partir de las cuales se fija una sensibilidad máxima para la k_{eff} que indica la diferencia máxima admisible, y a partir de ese valor añadir más términos a los polinomios

de las secciones eficaces y crear librerías tabuladas con mayor número de puntos. Como se verá en el capítulo 7, ésta será la evolución del trabajo realizado en el presente proyecto en un futuro, cuando se quiera aplicar una librería parametrizada en cálculos reales donde venga fijado la tolerancia admisible entre diferentes modelos.

Capítulo 7

Conclusiones y trabajo futuro

Este séptimo capítulo cierra el proyecto fin de carrera. En él se resumen a modo de conclusiones las observaciones y aspectos más importantes sobre la funcionalización realizada, destacando ventajas e inconvenientes de la misma. Asimismo se comenta un aspecto muy importante con vista a la implementación y uso futuro de las librerías parametrizadas como es el caso del tratamiento de incertidumbres y sensibilidades en los datos. Esta cuestión ha sido tratada en este proyecto según una metodología que se explicará, pero por falta de tiempo no ha llegado a completarse del todo, por lo que se deja como puerta abierta a un trabajo futuro.

7.1. Conclusiones

Una vez realizada la creación y elaboración de la librería parametrizada, y verificada su correcta implementación en el código de difusión 3D COBAYA3 hay que llevar a cabo a modo de conclusión final una lista con las ventajas e inconvenientes que conlleva. Como ventajas pueden resumirse las siguientes:

1. Espacio de memoria: la ventaja más importante supone la gran reducción de memoria necesaria para el almacenamiento de la librería parametrizada frente a una tabulada. En el caso de esta última se almacenan para cada combinación de *data points* los diferentes valores de secciones eficaces y demás parámetros, lo que hace que si se quiere disponer de una librería precisa se requiere un elevado número de puntos, que conduce a requisitos muy elevados de memoria. Sin embargo en la librería parametrizada se almacenan las dependencias con cada variable y permite reproducir el valor de la sección eficaz para cualquier combinación. Por otra parte este requerimiento de memoria también se nota en los tiempos de cálculo, especialmente en problemas globales a nivel de núcleo completo, donde hay un constante cálculo de las secciones eficaces en el procedimiento iterativo como consecuencia del acoplamiento termohidráulico.
2. Número de *data points*: el procedimiento de elaboración de una librería parametrizada requiere menor número de *data points* que en el caso de una tabulada. En ésta

es mayor si se quiere tener una buena aproximación en puntos intermedios, pues la operación de interpolación lineal puede conllevar pérdida de información cuando el comportamiento no sea estrictamente lineal y obliga a tener mayor número de *data points* para reducir el intervalo entre ellos. También cuando se quiere tener en la librería reflejados los efectos espaciales y espectrales es necesario tener mayor densidad de puntos con el valor exacto de las secciones eficaces para intentar captar estos efectos.

3. Incorporación de nuevas variables: la adición de una nueva variable de estudio, como por ejemplo el quemado, es más sencilla para la librería funcionalizada ya que simplemente hay que añadir los términos pertinentes al polinomio de ajuste, mientras que para la librería multidimensional exige rehacerla entera para incorporar los diferentes pasos de quemado. En el primero caso habría que estudiar la dependencia y los posibles efectos cruzados, mientras que en el segundo calcular los nuevos valores de las secciones eficaces para todas las combinaciones de *data points* y almacenarlos.

Las limitaciones que presenta son en cambio:

1. Procedimiento de elaboración: el proceso de creación desde cero de la librería parametrizada es notablemente más laborioso y costoso. Ello es debido a la exigencia de tener que realizar los procedimientos de ajuste uno a uno con cada variable en un programa estadístico de una manera deductiva para ir obteniendo los efectos cruzados, para después proponer los polinomios de ajuste finales. También exige la elaboración del sistema de rutinas y subrutinas necesario para poder implementar en el código de difusión posterior las dependencias y coeficientes de cada variable. Sin embargo para la librería tabulada simplemente hay que almacenar en el formato adecuado los valores de los parámetros, una vez que se tienen éstos en los outputs del código de transporte.
2. Pérdida de información en parámetros poco dependientes: en el caso de parámetros que no dependen explícita y claramente de una variable, y su dependencia es muy escasa, el procedimiento de aproximación mediante un polinomio puede que sea menos exacto y que no reproduzca fidedignamente los valores. Un ejemplo es con los factores de discontinuidad obtenidos mediante la teoría GET. Normalmente no dependen de una forma clara con las variables y su aproximación por polinomio exige un polinomio muy grande con un exceso de términos. Para ese tipo de casos puede resultar mejor el almacenamiento de los valores en una tabla y llevar a cabo una interpolación lineal para puntos intermedios.

7.2. Incertidumbres y sensibilidades

En los últimos años está habiendo una demanda creciente de la industria nuclear para que los cálculos de reactores “*best-estimate*” sean suministrados con sus márgenes de confianza. Prueba de ello es que el Comité de Ciencia Nuclear de la OCDE/NEA constituyó en

2005 un grupo de expertos en análisis de incertidumbres, que ha definido el “OECD Benchmark for Uncertainty Analysis in Best-Estimate Modelling -UAM- for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs” [7]. El objetivo es contribuir al desarrollo y evaluación de métodos de cuantificación de incertidumbres para simulaciones de reactores multi-escala y multi-física. Por otra parte, este interés también se ha puesto de manifiesto en el futuro proyecto europeo NURENEXT, donde una de las tareas propuestas incluye la evaluación de incertidumbres debida a librerías de datos nucleares, parámetros del sistema y modelos acoplados.

7.2.1. Aplicación al caso de una librería parametrizada: optimización

En este proyecto se han aplicado ciertas teorías sobre sensibilidad con objeto de optimizar el número de términos de los polinomios de ajuste, y poder suprimir aquéllos cuyo peso no sea influyente con objeto de simplificar y reducir el tamaño de la librería. La validación no ha podido ser realizada, entre otros motivos porque tampoco es el objetivo de este proyecto. Por ello se deja como trabajo futuro para su desarrollo en el futuro proyecto NURENEXT.

Esta aplicación está basada en la denominada sensibilidad relativa. El problema surge cuando se quiere conocer la variación admisible en la sección eficaz $\delta\Sigma$ si tenemos una variación máxima admisible en la k_{eff} , δk . Si por ejemplo permitimos una oscilación de $\pm 10pcm$ máxima en la k_{eff} debida a cada contribución de la incertidumbre en una sección eficaz, y conocemos la sensibilidad absoluta de la k_{eff} a esa sección eficaz, definida como $\frac{\partial k}{\partial \Sigma}$; entonces tenemos:

$$|\delta k| \leq 10pcm = 10^{-4}$$

$$\frac{\delta k}{\delta \Sigma} = S_{\Sigma}^k$$

$$|\delta k| = |S_{\Sigma}^k \cdot \delta \Sigma| \leq 10^{-4} \longrightarrow |\delta \Sigma| \leq \frac{10^{-4}}{|S_{\Sigma}^k|}$$

Si además conocemos el “valor nominal” de la sección eficaz, que en nuestro caso se corresponde con la calculada por el código de transporte NEWT podemos acotar los errores (incertidumbres) relativos y tener una base de comparación entre secciones eficaces:

$$\frac{|\delta \Sigma|}{\Sigma} \leq \frac{10^{-4}}{|S_{\Sigma}^k| \cdot \Sigma}$$

Se define la sensibilidad relativa como $S_{r,\Sigma}^k = \frac{\delta k \cdot \Sigma}{\delta \Sigma \cdot k} = S_{\Sigma}^k \cdot \frac{\Sigma}{k}$. Podemos expresar la acotación anterior en función de este nuevo parámetro quedando finalmente:

$$\frac{|\delta \Sigma|}{\Sigma} \leq \frac{10^{-4}}{|S_{r,\Sigma}^k| \cdot k} \cdot 100 \%$$

Por tanto conocidos los valores de la sensibilidad relativa para cada grupo se puede verificar si la diferencia entre la sección eficaz obtenida por la librería parametrizada y la “real” cumple la inecuación anterior. Si la cumple se puede probar a quitar un término del polinomio, para lo cual es necesario recurrir a la tabla ANOVA (ANalysis Of VAriance) para saber cuál quitar, y volver a analizar si la nueva diferencia sigue en los márgenes permitidos por la desigualdad anterior. Si se mantiene entonces el término suprimido no era necesario. De esta forma se puede minimizar el número de términos reduciendo memoria.

Si el término anterior resultase mayor entonces habría que añadir términos nuevos al ajuste. Como trabajo futuro queda realizar estas comparaciones optimizando el tamaño de los polinomios de ajuste, junto con estudiar otros posibles parámetros sensibles a variaciones de las secciones eficaces, tales como las distribuciones de potencia. Unido a esto cabrá también la posibilidad de extender este estudio de propagación y cuantificación de incertidumbres a códigos de difusión como COBAYA3, mediante la implementación de técnicas como la del cálculo del flujo adjunto.

ANEXOS

Anexo A

Tablas de composición de materiales para la generación de inputs

En este anexo incorporamos las tablas obtenidas en un benchmark de la NEA con las composiciones según isótopos de los materiales que intervienen en los cálculos del código NEWT. Se adjuntan las tablas para los materiales del acero de las vainas, para el recubrimiento IFBA y para el propio combustible UO_2 . Para éstos dos últimos la composición isotópica va variando con el quemado: el recubrimiento IFBA se va consumiendo a medida que transcurre el ciclo de quemado, igual que sucede con el uranio del combustible, que va consumiéndose mientras que van apareciendo nuevos productos de fisión como consecuencia de las reacciones nucleares. Por eso para un quemado de $0\text{ MWd}/t.U$ los únicos isótopos presentes en el combustible son el U-238, el U-235 y el O-16.

El programa creacompos lo que hace es seleccionar la columna correspondiente según el paso de quemado que se le introduzca cuando se le llama, y lo exporta en el formato que precisa NEWT. Para el agua que actúa como refrigerante y moderador no es preciso el uso de ninguna tabla, ya que el programa creacompos calcula la isotopía del agua según las condiciones de densidad y concentración de boro disuelta en el moderador, parámetros que nuevamente se introducen la llamar al programa.

Por tanto para llamar al creacompos para que nos genere la parte del input de NEWT correspondiente a la isotopía de los materiales para unas condiciones determinadas hay que especificarle el paso de quemado, que en este proyecto se ha empleado siempre 0, y condiciones locales de operación. Todo ello de la forma que ilustra el siguiente ejemplo:

```
creacompos-nodal uo2.csv clad.csv IFBA.csv Paso-de-quemado Temp.comb.  
Temp.mod. ppm densidad
```

Los archivos .csv son las tablas del benchmark de la NEA que a continuación se adjuntan.

Quemado [GWd/t]		0	0.15	17.5	20	22.5	32.5	35	37.5
Isótopo	Identifíer	1	2	3	4	5	6	7	8
B-10	5010	3.5900E-03	3.5047E-03	1.6775E-04	1.0349E-04	6.3039E-05	7.5415E-06	4.2693E-06	2.3779E-06
B-11	5011	1.4450E-02	1.4450E-02	1.4450E-02	1.4450E-02	1.4450E-02	1.4450E-02	1.4450E-02	1.4450E-02
Zr-nat	40000	9.0206E-03	9.0206E-03	9.0206E-03	9.0206E-03	9.0206E-03	9.0206E-03	9.0206E-03	9.0206E-03

Tabla A.1: Tabla de composiciones para el material IFBA en función del quemado (unidades átomos/barnio·cm)

Quemado [GWd/t]		0	0.15	17.5	20	22.5	32.5	35	37.5
Isótopo	Identifíer	1	2	3	4	5	6	7	8
U-235	92235	9.7149E-04	9.67328E-04	5.80775E-04	5.36589E-04	4.9476E-04	3.49384E-04	3.18203E-04	2.88980E-04
U-236	92236	-	7.92924E-07	7.11583E-07	7.86753E-05	8.5648E-05	1.08470E-04	1.12982E-04	1.17044E-04
U-238	92238	2.1879E-02	2.18773E-02	2.16336E-02	2.15964E-02	2.1556E-02	2.13988E-02	2.13569E-02	2.13140E-02
Pu-239	94239	-	7.54884E-07	1.07858E-04	1.14067E-04	1.1905E-04	1.30075E-04	1.31236E-04	1.31952E-04
Pu-240	94240	-	1.43304E-09	2.21196E-05	2.60945E-09	3.0000E-05	4.43591E-05	4.75380E-05	5.05287E-05
O-16	8001	4.5702E-02	4.57018E-02	4.57018E-02	4.57018E-02	4.5702E-02	4.57018E-02	4.57018E-02	4.57018E-02
Sm-149	62649	-	1.46942E-08	1.07522E-07	1.08046E-07	1.0813E-07	1.05255E-07	1.03964E-07	1.02526E-07
Xe-135	54635	-	1.07437E-08	1.03187E-08	1.01536E-08	9.9768E-09	9.19257E-09	8.98623E-09	8.77906E-09
Np-239	93239	-	1.06838E-06	1.62883E-06	1.65984E-06	1.6926E-06	1.83717E-06	1.87603E-06	1.91571E-06
I-135	53635	-	2.21570E-08	2.21623E-08	2.21696E-08	2.2178E-08	2.22136E-08	2.22230E-08	2.22323E-08
Cs-137	55637	-	2.21879E-07	2.56015E-05	2.92085E-05	3.2802E-05	4.70445E-05	5.05716E-05	5.40854E-05
Am-241	95241	-	-	1.76423E-07	2.49678E-07	3.3309E-07	7.19747E-07	8.17423E-07	9.11165E-07
I-129	53629	-	1.75905E-08	2.94504E-06	3.42834E-06	3.9208E-06	5.96505E-06	6.49137E-06	7.02266E-06

Tabla A.2: Extracto de la tabla de composiciones del combustible UO_2 en función del quemado (unidades átomos/barnio·cm)

Anexo B

Presupuesto

Para realizar una valorarización económica del trabajo realizado se incluye este anexo a modo de presupuesto. Conviene destacar que la valoración económica que aquí se realiza es simplemente a modo orientativo, y no se corresponde con un presupuesto de un proyecto de ejecución material, como pueda ser una construcción o el desarrollo de un equipo.

El presente proyecto se puede englobar dentro de la categoría de proyecto de investigación, dentro del proyecto NURISP del 7º Programa MARCO de EURATOM. Según los documentos oficiales de dicho proyecto, y que aquí no pueden ser publicados por medidas de confidencialidad, el coste incurrido por hora trabajada de un becario asciende a 10,826 €/h.

Se contabilizan 131 horas de trabajo en un mes, que multiplicado por 11 meses de trabajo al año equivalen a:

$$131h/mes \times 10,826€/h \times 11mes/año = 15600€/año$$

Como este salario se recibe en 12 pagas mensuales al mes se percibe:

$$\frac{15600€}{12} = 1300€/mes$$

Este sueldo es sin cotización a la Seguridad Social, y dado que no se alcanza el sueldo base mínimo no hay ningún tipo de descuento a realizar por Hacienda en calidad de IRPF. Sólo se realiza el descuento mínimo del 2 %, que en este caso sería imputable en la declaración de la renta del año 2011 para que fuese devuelto. Con el descuento del 2 % el sueldo a percibir mensualmente es de 1294 €.

Por tanto, considerando que el autor del presente proyecto fin de carrera ha estado contratado seis (6) meses en el Departamento de Ingeniería Nuclear de la UPM llevando

a cabo la investigación, práctica y realización de este proyecto, encuadrado de manera íntegra dentro del proyecto NURISP, SP1 (Sub-Project 1); la valoración económica por todo el trabajo realizado puede cuantificarse en:

$$6 \times 1300 = 7800\text{€}$$

Hay que dejar constancia expresa de que el proyectando no ha percibido esta remuneración, ya que ha realizado el proyecto fin de carrera mediante la concesión de una beca de la cátedra Federico Goded, de características diferentes. Los valores porporcionados son simplemente orientativos a modo de reflejo y traducción económica del trabajo realizado.

Anexo C

Programación temporal de las actividades realizadas

En el siguiente anexo se resume la secuencia de actividades realizadas en la ejecución del presente proyecto. Las tareas realizadas son diversas, desde la lectura y traducción de deliverables del proyecto NURISP hasta la realización manual de los ajustes para proponer los polinomios aproximantes en el programa R pasando por la redacción del proyecto o la programación de las rutinas empleadas.

En la tabla C.1 se detalla la relación de actividades realizadas con fecha de inicio y fecha de finalización de cada una de ellas.

Anexo C. Programación temporal de las actividades realizadas

Nombre de la actividad	Fecha de comienzo	Fecha de fin
Incorporación al Dpto. Ingeniería Nuclear.	4-Oct-2010	
Lectura del manual de NEWT. Elaboración de inputs	4-Oct-2010	8-Oct-2010
Revisión y corrección de los inputs	14-Oct-2010	15-Oct-2010
Elaboración y corrección del programa CREACOMPOS	18-Oct-2010	21-Oct-2010
Creación de la rutina para generar los inputs de NEWT	25-Oct-2010	25-Oct-2010
Ejecución de casos de prueba con NEWT	25-Oct-2010	27-Oct-2010
Modificación y creación de las rutinas post-proceso	27-Oct-2010	28-Oct-2010
Manejo del R con los casos de prueba	2-Nov-2010	5-Nov-2010
Ejecución casos definitivos	10-Nov-2010	22-Nov-2010
Elaboración del índice y estructura PFC con la tutora	15-Nov-2010	15-Nov-2010
Lectura y traducción deliverables de NURISP	16-Nov-2010	19-Nov-2010
Redacción primer capítulo	18-Nov-2010	22-Nov-2010
Redacción segundo y tercer capítulo	23-Nov-2010	3-Dic-2010
Ajuste en R de las xs y coeficientes GET	1-Dic-2010	17-Dic-2010
Análisis y conclusiones de los ajustes	20-Dic-2010	22-Dic-2010
Revisión y completación de la redacción del PFC	27-Dic-2010	30-Dic-2010
Ajuste en R de los términos cinéticos y xs de disp.	10-Ene-2011	14-Ene-2010
Redacción cuarto y quinto capítulo	17-Ene-2011	25-Feb-2011
Desarrollo programa ICPO y sus rutinas	7-Feb-2011	18-Feb-2011
Revisión de la redacción del PFC. Anexos A y B	28-Feb-2011	4-Mar-2011
Ejecución del COBAYA en 2D	7-Mar-2011	9-Mar-2011
Ejecución del COBAYA en 3D	10-Mar-2011	16-Mar-2011
Redacción capítulos sexto y séptimo	8-Mar-2011	16-Mar-2011
Revisión general del PFC	17-Mar-2011	17-Mar-2011

Tabla C.1: Secuencia temporal de actividades realizadas

Bibliografía

- [1] J.M. Aragones, C. Diop, and U. Rohde. Status and limits of current methods for plant analysis, deliverable d1.0, subproject core physics (sp1). Technical report, NURISP Project, 2010.
- [2] S. Bowman and L. Leal. *ORIGEN-ARP: Automatic rapid process for spent fuel depletion, decay and source term analysis*. Oak Ridge National Laboratory, March 2000. ORNL/TM-2000/39 Version 6 Vol. I, Sect. D1.
- [3] Radiation Safety Information Computational Center. Scale: A modular code system for performing standardized computer analyses for licensing evaluation, ORNL/TM-2005/39, version 5, vols. i-iii. Technical report, Oak Ridge National Laboratory, 2005.
- [4] École Polytechnique de Montréal. www.polymtl.ca/nucleaire/dragon/.
- [5] Mark D. DeHart. *TRITON: a Two-Dimensional Transport and Depletion Module for Characterization of Spent Nuclear Fuel*. Oak Ridge National Laboratory, January 2009. ORNL/TM-2005/39 Version 6 Vol. I, Sect. T1.
- [6] M.D. DeHart. *NEWT: a New Transport Algorithm for Two-Dimensional Discrete Ordinates Analysis in Non-Orthogonal Geometries*. Mark D. DeHart, November 2006. Version 5.1 Vol.II, Book 4, Sect.F21.
- [7] K. Ivanov et al. Specification and supporting data for the neutronics cases (phasel) version1.0. Technical report, NEA/NSC/DOC, 2007. Benchmark for Uncertainty Analysis in Modeling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, vol1, pp23.
- [8] J.J. Faraway. *Practical Regression and Anova using R*, July 2002.
- [9] J. García-Herranz, N.and Herrero and J.A. Lozano. *PWR lattice benchmarking specifications*, January 2010. Deliverable NURISP Project.
- [10] N. García-Herranz. *Desarrollo de un modelo nodal tridimensional, con efectos de heterogeneidad en las secciones eficaces y factores de discontinuidad, para análisis de núcleos PWR*. PhD thesis, E.T.S. de Ingenieros Industriales, 2000.

-
- [11] N. García-Herranz and J.J. Herrero. *Definition and tools for Advanced Cell and Nodal Cross Section Libraries*, November 2010. Deliverable D1.2.2 NURISP Project, pages 9-10-11-12.
- [12] S. Goluoglu, S. Bowman, and M. Dunn. *KENO Monte Carlo Code Capabilities*. American Nuclear Society, 2007. Winter Meeting, November 11-15 2007, Washington D.C.
- [13] A. Hébert. *Applied Reactor Physics*. Presses Internationales Polytechnique, 2009.
- [14] J. J. Herrero, J. Jimenez, J. A. Lozano, N. García-Herranz, C. Ahnert, and J. M. Aragonés. The 3d cell-nodal multi-scale cobaya3 code. Technical report, Departamento de Ingeniería Nuclear (DIN), Universidad Politécnica de Madrid (UPM), 2008.
- [15] J.W. Jackson and N.E. Todreas. COBRA IIIC/MIT-2: A digital computer program for steady and transient thermal-hydraulic analysis of rod bundle nuclear fuel elements. Technical Report MIT-EL 81-018, MIT Energy Laboratory, 1981.
- [16] J. Jiménez. *Desarrollo e implementación de la descomposición en subdominios del acoplamiento neutrónico-termohidráulico mediante disecciones alternadas con un sistema de cálculo multiescala*. PhD thesis, E. T .S. I. Industriales, Universidad Politécnica de Madrid, 2010.
- [17] N. Kolev, I. Spasov, and E. Royer. Vver-1000 coolant transient benchmark phase 2 (v1000ct-2), vol.4: Results of mslb calculations. Technical report, Draft OECD NEA/NSC/DOC, 2009.
- [18] N. P. Kolev, N. Petrov, J. Donovan, and D. Angelova. Vver-1000 coolant transient benchmark phase 2 (v1000ct-2), vol. ii: Mslb problem, final specifications. Technical report, OECD NEA/NSC/DOC (2006)6, 2006.
- [19] J. Leppänen. *PSG2/Serpent: a Continous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code*, May 2010.
- [20] J.A. Lozano. *Desarrollo de un Código Nodal Analítico de Difusión Neutrónica en Multigrupos para Reactores en Geometrías 3D Rectangulares y Hexagonales*. PhD thesis, Universidad Politécnica de Madrid, 2010.
- [21] J.A. Lozano, Aragonés J.M., and N. García-Herranz. The analytic nodal diffusion solver andes in multigroups for 3d rectangular geometry: Development and performance analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 35:2365–2374, 2008.
- [22] J.M. Martínez-Val and M. Piera. *Reactores Nucleares*. E.T.S.I.Industriales, 1997.
- [23] NURISP Project. *Description of work*, November 2008. Annex I.
- [24] C.I. Paik, L.E. Hochreiter, J.M. Kelly, and R.J. Kohrt. Analysis of the flecht-seaset 163-Rod blocked bundle data using COBRA-TF. Technical Report NUREG/CR-4166, U.S. Nuclear Regulatory Commission, October 1985.

- [25] EDF OpenCascade SALOME Development Team, CEA. <http://www.salome-platform.org/>, 2005-2010.
- [26] TRIPOLI4 team. *TRIPOLI4 Monte-Carlo Transport Code*. CEA (Saclay), 2004.
- [27] X-5 Monte Carlo Team. *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code*. Los Alamos National Laboratory, 2003. Version 5, Volume I: Overview and Theory Report.
- [28] AEA Technology. *WIMSD: A Neutronics Code for Standard Lattice Physics Analysis*, 1997. NEA Databank.
- [29] M.J. Thurgood, J.M. Kelly, T.E. Guidotti, R.J. Kohrt, and K.R. Crowell. Cobra/trac-a thermal-hydraulics code for transient analysis of nuclear reactor vessels and primary coolant systems. equations and constitutive models nureg/cr-3046. Technical report, Pacific Northwest Laboratory, 1982.
- [30] I. Toumi, A. Bergeron, D. Gallo, E. Royer, and D. Caruge. FLICA-4: a three-dimensional two-phase flow computer code with advanced numerical methods for nuclear applications. *Nuc. Eng. Desing*, 200:139–155, 2000.
- [31] R. Sánchez; J. Mondot; Z. Stankovski; A. Cossic; I. Zmijarevic. Apollo-ii - a user-oriented, portable, modular code for multigroup transport assembly calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 100:352, 1988.